



UNIVERSITAT_{DE}
BARCELONA

Contribución al estudio de las superficies de respuesta

Joan Mata Álvarez



Aquesta tesi doctoral està subjecta a la llicència **Reconeixement 4.0. Espanya de Creative Commons.**

Esta tesis doctoral está sujeta a la licencia **Reconocimiento 4.0. España de Creative Commons.**

This doctoral thesis is licensed under the **Creative Commons Attribution 4.0. Spain License.**

R. 15998

UNIVERSIDAD DE BARCELONA
FACULTAD DE QUIMICA

CONTRIBUCION AL ESTUDIO DE
LAS SUPERFICIES DE RESPUESTA

BIBLIOTECA DE LA UNIVERSITAT DE BARCELONA



0700448876

Memoria que, para optar al
Grado de Doctor en Ciencias,
Sección de Químicas, presenta

D. JUAN MATA ALVAREZ

Barcelona, Marzo de 1977

RECONOCIMIENTO

La presente investigación se ha realizado en el Departamento de Química Técnica de la Facultad de Química de la Universidad de Barcelona, bajo la dirección del Catedrático Profesor Dr. D. José Costa López, Director de dicho Departamento. Es mi deseo expresarle desde aquí mi más sincera gratitud por su interés, apoyo y facilidades de toda índole que en todo momento me ha dispensado, y que han posibilitado la realización de este trabajo.

Asimismo y, muy especialmente, quiero hacer patente mi profundo agradecimiento al Dr. D. Francisco Javier Domingo Campos por sus valiosísimos consejos e inestimable ayuda de todo orden prestada a lo largo del desarrollo de esta investigación.

Igualmente he de agradecer al Ministerio de Educación y Ciencia la ayuda económica aportada al -- concederme una de las Becas del Plan de Formación de Personal Investigador.

Finalmente, no quisiera olvidar tampoco a todos mis compañeros y personal no docente de este Departamento y de la Facultad por la eficaz colaboración que en su momento me prestaron, así como a la empresa Tensia-Surfac, la desinteresada donación de los productos utilizados en la parte experimental de esta investigación.

I N D I C E

1.- INTRODUCCION	8
1.1.- <u>Antecedentes históricos</u>	10
1.2.- <u>Diseños experimentales y ajuste de superficies de respuesta</u>	11
1.2.1.- Ajuste polinomial a la superficie de respuesta	12
1.2.2.- Propiedades de los diseños experimentales	14
1.2.3.- Ajuste polinomial por el método de mínimos cuadrados	15
1.2.4.- La matriz momento del diseño	17
1.2.5.- Diseños ortogonales	19
1.2.6.- Función varianza y diseños rotatorios	21
1.2.7.- Condiciones para que un diseño sea rotatorio	22
1.2.8.- Momentos de un diseño rotatorio	24
1.2.9.- Efecto de transformaciones sobre momentos nulos	27
1.2.10.- Diseños rotatorios	27
1.2.10.1.- Matriz momento y de sesgo	28
1.2.10.2.- Diseños rotatorios de primer orden	28
1.2.10.2.1.- Coeficientes de la ecuación	32
1.2.10.2.2.- Análisis de varianza	33
1.2.10.3.- Diseños rotatorios de segundo orden	33
1.2.10.3.1.- Coeficientes de la ecuación	54
1.2.10.3.2.- Análisis de varianza	56
1.2.10.4.- Diseños rotatorios de tercer orden	57

1.2.10.4.1.- Coeficientes de la ecuación	66
1.2.10.4.2.- Análisis de varianza	66
2.- OBJETO DE LA PRESENTE INVESTIGACION	67
3.- ESTUDIO DE LAS SUPERFICIES DE RESPUESTA EN ESPACIOS K-DIMENSIONALES	71
3.1.- <u>Superficies de primer orden</u>	72
3.1.1.- Diferentes combinaciones posibles para la formación de diseños rotatorios secuenciales en los distintos espacios k-dimensionales	73
3.1.1.1.- Combinación de diseños Simplex	74
3.1.1.2.- Combinación de diseños factoriales fraccionados	83
3.1.1.3.- Diseños axiales	91
3.1.2.- Discusión de los diseños propuestos	95
3.2.- <u>Superficies de segundo orden</u>	102
3.2.1.- Diseños rotatorios de segundo orden en espacios bidimensionales	102
3.2.1.1.- Combinación de pentágonos	105
3.2.1.2.- Combinación de hexágonos	110
3.2.1.3.- Combinación de heptágonos	111
3.2.1.4.- Combinación de octógonos	112
3.2.2.- Discusión de los diseños propuestos	114
3.3.- <u>Superficies de tercer orden</u>	117
3.3.1.- Diseños rotatorios de tercer orden en espacios bidimensionales	117
3.3.1.1.- Distribución de la varianza	119
3.3.1.2.- Sesgo de los coeficientes	121
3.3.1.3.- Puntos centrales y relación de radios	125

3.3.1.4.- Estudio particular de los - diseños	125
3.3.1.4.1.- Combinación de octógono- nos	130
3.3.1.4.2.- Combinación de heptágo- nos	140
3.3.1.4.3.- Combinación mixta de - heptágonos y octógonos	151
3.3.2.- Estimación de los coeficientes	151
3.3.3.- Análisis de varianza	153
3.3.4.- Discusión de los diseños propues- tos	156
4.- SIMULACION EXPERIMENTAL SOBRE FUNCIONES MULTIVA- RIABLES	158
4.1.- <u>Superficies de primer orden</u>	159
4.1.1.- Procedimiento	159
4.1.2.- Resultados obtenidos	160
4.1.2.1.- Función F-1	160
4.1.2.2.- Función F-2	186
4.1.2.3.- Función F-3	211
4.1.2.4.- Función F-4	236
4.1.2.5.- Función F-5	261
4.1.3.- Discusión de los resultados	286
4.2.- <u>Superficies de segundo orden</u>	292
4.3.- <u>Superficies de tercer orden</u>	293
4.3.1.- Procedimiento	293
4.3.2.- Resultados obtenidos	294
4.3.2.1.- Función F-6	294
4.3.2.2.- Función F-7	299
4.3.3.- Discusión de los resultados	304
5.- ESTUDIO EXPERIMENTAL Y DISCUSION DE LOS RESULTA- DOS	305

5.1.- <u>Estudio experimental de los diseños de -</u>	
<u>primer orden</u>	306
5.1.1.- Productos y dispositivo experimen	
tal	306
5.1.2.- Variables y limitaciones en las -	
mismas	309
5.1.3.- Resultados experimentales	310
5.1.3.1.- Resultados obtenidos con -	
el diseño 2^5 factorial frac	
cionado	310
5.1.3.2.- Resultados obtenidos con -	
el diseño axial	323
5.1.4.- Discusión de los resultados . . .	335
5.2.- <u>Estudio experimental de los diseños de -</u>	
<u>segundo y tercer orden</u>	336
5.2.1.- Productos y procedimiento experi-	
mental	336
5.2.2.- Variables seleccionadas y región	
estudiada	337
5.2.3.- Resultados experimentales	338
5.2.3.1.- Estimación de la ecuación	
de segundo orden	339
5.2.3.2.- Estimación de la ecuación	
de tercer orden	344
5.2.4.- Discusión de los resultados . . .	346
6.- DISCUSION GENERAL DE LOS DISEÑOS EXPERIMENTALES	350
6.1.- <u>Espacios bidimensionales</u>	351
6.1.1.- Obtención de condiciones óptimas	
mediante el método de Box-Wilson	351
6.1.2.- Ajuste secuencial de relaciones	
polinomiales.	353
6.2.- <u>Otros espacios k-dimensionales</u>	357
7.- RESUMEN Y CONCLUSIONES	359

8.- RECOMENDACIONES	362
-------------------------------	-----

APENDICES

1.- Análisis de varianza para diseños ortogonales - de primer orden	363
2.- Determinación de la ecuación canónica en espa-- cios k-dimensionales	366
3.- Análisis de varianza para diseños ortogonales - de segundo orden	370
4.- Zona experimental de estudio y matriz de diseño	372
5.- Cálculo de la varianza de las respuestas estima <u>da</u> das	375

NOMENCLATURA	377
------------------------	-----

BIBLIOGRAFIA	380
------------------------	-----

1.- INTRODUCCION

Frecuentemente, en el campo de la investigación química, el experimentador se halla ante la necesidad de obtener unas condiciones óptimas de operación.- En todo estudio existirán ciertamente una serie de variables controlables (factores), tales como temperatura, -- presión, concentración de los componentes, etc., y una -- serie de variables dependientes de aquellas (respuestas) como pueden ser la pureza de un producto, el rendimiento de una operación, el coste, etc.. El problema consiste en establecer qué combinación de los factores proporciona un conjunto de una o varias respuestas adecuado.

Básicamente este problema se ha tratado -- bajo dos enfoques distintos. Por una parte se han desarrollado métodos totalmente empíricos que establecen u-- nas condiciones de operación supuestamente óptimas, sin aportar información sobre la influencia de las variables controlables en la respuesta o respuestas. En este grupo se pueden incluir el clásico método de variación de -- un factor formalizado por Friedman y Savage (1), el método Simplex propuesto por Spendley, Hext y Himsworth (2), e incluso técnicas que inicialmente fueron desarrolladas para la optimación numérica, es decir, en ausencia de error, como el método Complex de M. J. Box (3) y las modificaciones propuestas por Nelder y Mead (4), así como -- por Umeda e Ichikawa (5), y que pueden ser adaptadas a -- la optimación empírica (método Reflex de R. W. Glass(6)) Asimismo debe ser incluido en este grupo el método aleatorio de optimación introducido por Satterwhite (7). La segunda forma de considerar el problema, consiste en ascender a las condiciones óptimas mediante un estudio es-

tadístico de la influencia de las variables sobre la respuesta o respuestas a optimar, de acuerdo con el método semiempírico de optimación de G.E.P.Box y W.J.Wilson --- (8). En esencia este método consiste en ajustar una superficie de respuesta polinomial por medio de un diseño experimental, y con la información obtenida, realizar un posterior desplazamiento de las condiciones de operación hacia el óptimo.

La determinación de superficies de res--- puesta mediante diseños experimentales constituye pues - un método valiosísimo para la estimación de la influen-- cia de las variables controlables sobre la respuesta o - respuestas a considerar, y en los casos en que sea oportuno para poder determinar qué combinación de los factores conduce a la obtención de unas condiciones óptimas - de operación. Es por ello que la metodología de las superficies de respuesta se estudia con cierto detalle en los apartados siguientes.

1.1.- ANTECEDENTES HISTORICOS

El estudio de las superficies de respuesta mediante ajuste polinomial, puede considerarse iniciado en el año 1935 con el trabajo de Yates (9), en el cual se halla implícita la idea de una función que relaciona la respuesta con los niveles de una serie de variables en un experimento factorial. No obstante, el impulso definitivo para el estudio y ajuste polinomial de las superficies de respuesta, no se produjo hasta el año 1951 con la publicación del importante trabajo de G.E.P. Box y W.J. Wilson (8), en el cual se desarrolla la noción de diseño experimental, introduciéndose los llamados diseños factoriales compuestos, para el ajuste de relaciones polinomiales de segundo orden. En 1957 G.E.P. Box y J.S. Hunter proponen nuevos tipos de diseños a los que denominan diseños rotatorios. Basados en este estudio y en años sucesivos, se han publicado distintos trabajos en los que se describen nuevos diseños de segundo orden, como son los de R.C. Bose en 1959 (11), G.E.P. Box y D.W. Behnken en 1960 (12), N.R. Draper en 1960 y P.J. Thaker en 1962 (13) y (14), M.N. Das y V.L. Narasimham en 1962 (15), G.E.P. Box y N.R. Draper en 1963 (16), M.N. Das en 1963 (17), A.M. Herzberg en 1967 (18), N.R. Draper y A.M. Herzberg en 1968 (19), así como, paralelamente, los de D.A. Gardiner, A.H.E. Grandage, R.J. Hader en 1959 (20) y los de N.R. Draper en 1960, 1961 y 1962 (21),(22),(23), en los que se describen diseños de tercer orden.

1.2.- DISEÑOS EXPERIMENTALES Y AJUSTE DE SUPERFICIES DE RESPUESTA

En general toda respuesta η dependiente de k variables $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k$, está relacionada con éstas por medio de cierta función ϕ desconocida:

$$\eta = \phi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k) \quad (1.1)$$

Para explorar esta relación, supóngase -- que se realizan N experimentos, y que el u -ésimo de ellos, realizado según unas condiciones predeterminadas de las variables $\xi_{1u}, \xi_{2u}, \dots, \xi_{ku}$, conduzca a la respuesta y_u . El conjunto de estos N puntos experimentales constituye lo que se denomina diseño experimental, y tiene por objeto el conocimiento de la superficie de respuesta representada por la ecuación 1.1.

Para el estudio de los diseños experimentales conviene adoptar una serie de variables estandarizadas, de modo que los momentos de segundo orden para estas variables respecto a sus medias sean igual a la unidad (8), (10), (24). Para ello se definen dichas variables de la forma siguiente:

$$x_{iu} = \frac{\xi_{iu} - \bar{\xi}_i}{S_i} \quad (1.2)$$

donde $\bar{\xi}_i$ es el valor medio de las ξ_{iu} y por otra parte S_i es:

$$S_i = \left\{ \sum_{u=1}^N \frac{(\xi_{iu} - \bar{\xi}_i)^2}{N/c} \right\}^{1/2} \quad (1.3)$$

donde c es un factor de escala que en principio adopta el valor unidad.

Para estos niveles estandarizados deberá cumplirse:

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} = 0 \quad (1.4)$$

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 = N/c \quad (1.5)$$

El programa de N experimentos a realizar en términos de las nuevas variables así definidas, se representa mediante una matriz \underline{D} , $N \times k$, denominada matriz de diseño. Los elementos de la u -ésima fila son los valores de los niveles estandarizados $x_{1u}, x_{2u}, \dots, x_{ku}$ que se utilizan en el u -ésimo punto experimental de las variables.

A partir de los niveles estandar definidos de acuerdo con las ecuaciones 1.2 y 1.3, es posible disponer de distintas matrices de diseño apropiadas al número de dimensiones del espacio considerado y al tipo de función supuesto para ϕ . Así, de acuerdo con las circunstancias concretas de la experimentación, se podrán elegir valores medios convenientes $\bar{\epsilon}_1, \bar{\epsilon}_2, \dots, \bar{\epsilon}_k$ y unidades S_1, S_2, \dots, S_k de modo que el diseño cubra la subregión del espacio de interés inmediato. El nivel del i -ésimo factor que será usado en el u -ésimo experimento, vendrá dado por:

$$\epsilon_{iu} = \bar{\epsilon}_i + S_i x_{iu} \quad (1.6)$$

1.2.1.- AJUSTE POLINOMIAL A LA SUPERFICIE DE RESPUESTA

Se puede suponer que en la región estudiada la función ϕ está representada por un polinomio de orden d , lo cual, si las derivadas de la función existen

y son continuas será cierto por desarrollo en serie de Taylor alrededor del punto central de la región. De esta forma, la respuesta en el u -ésimo punto experimental vendrá dada por:

$$\begin{aligned} \eta_u = & \beta_0 x_{0u} + \beta_1 x_{1u} + \dots + \beta_k x_{ku} + \\ & + \beta_{11} x_{1u}^2 + \dots + \beta_{kk} x_{ku}^2 + \\ & + \beta_{12} x_{1u} x_{2u} + \dots + \\ & + \beta_{k-1,k} x_{k-1,u} x_{ku} + \dots + \\ & + \beta_{111} x_{1u}^3 + \dots \text{ etc.} \end{aligned} \quad (1.7)$$

Por convenio se denominará variables independientes a $x_0; x_1, \dots, x_k; x_1^2, \dots, x_k^2; x_1 x_2, \dots$, etc.. Evidentemente si el polinomio es de grado superior al -- primero, las variables independientes no son desde luego funcionalmente independientes.

Es posible obtener estimados b_0, b_1, \dots, b_k etc. de los coeficientes $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k$ etc., ajustando -- por mínimos cuadrados los N valores observados $y_1, y_2, \dots, y_u, \dots, y_N$ al polinomio expresado por la ecuación 1.7. A los coeficientes β_i se les denomina coeficientes lineales, a los coeficientes β_{ii} coeficientes cuadráticos, y a los coeficientes β_{ij} coeficientes de interacción. Las variables independientes $x_i, x_i^2, x_i x_j$, se denominan de forma similar, puesto que por necesidad en la notación matricial, se conviene en escribir $\beta_0 x_{0u}$, mejor que β_0 , haciendo x_{0u} igual a la unidad para todo u .

Un diseño que incluya k factores y permita estimar todos los coeficientes hasta el orden d , se denomina diseño k -dimensional de orden d . El número de puntos experimentales a realizar deberá ser superior a --

$\binom{k+d}{d}$, puesto que en el polinomio de orden d existen $\binom{k+d}{d}$ coeficientes a estimar.

1.2.2.- PROPIEDADES DE LOS DISEÑOS EXPERIMENTALES

Existe un cierto número de propiedades de carácter eminentemente práctico, y de una importancia relativa a la situación concreta del experimentador, que debería satisfacer todo diseño experimental. Estas pueden esquematizarse en los siguientes puntos (10):

(i) El diseño elegido deberá permitir el ajuste del polinomio deseado dentro de la región de interés.

(ii) El ajuste polinomial deberá ser lo más preciso posible, en el sentido de que los coeficientes estimados presenten varianzas mínimas y estén mínimamente sesgados por posibles coeficientes de orden superior.

(iii) El número de puntos experimentales de un diseño no debe ser excesivo, aunque si suficiente para un correcto ajuste y para permitir efectuar un posterior "test" estadístico de significación del mismo.

(iv) El diseño debe poder subdividirse en bloques de puntos experimentales (este hecho es útil en la práctica cuando las condiciones experimentales no son repetitivas).

(v) Si una vez completado un diseño para el ajuste de un polinomio de orden d , éste resultara inadecuado, debe ser posible la formación de otro diseño para ajustar un polinomio de orden $d+1$, agregando -

un bloque adicional de experimentos al conjunto primitivo.

El hecho de que un determinado diseño no cumpla todas las propiedades enunciadas, no es motivo para que no se considere útil, pues como se ha dicho, dependerá fundamentalmente de la situación experimental -- concreta ante la que se halle el investigador.

1.2.3.- AJUSTE POLINIMIAL POR EL METODO DE MINIMOS CUADRADOS

Todo modelo polinomial en el que existen una serie de ecuaciones referidas al mismo modelo, puede ser representado convenientemente en notación matricial. Así el expresado mediante la ecuación 1.7, en el que existen L coeficientes desconocidos y N puntos experimentales, vendrá representado por:

$$\underline{\eta} = \underline{X}\underline{\beta} \quad (1.8)$$

donde la matriz \underline{X} , $N \times L$, se denomina matriz de las variables independientes.

Si se representan los N valores experimentales observados mediante un vector \underline{Y} y además:

$$\varepsilon(\underline{Y}) = \underline{\eta} \quad (1.9)$$

$$\varepsilon(\underline{Y} - \underline{\eta})(\underline{Y} - \underline{\eta})' = \underline{I}_N \sigma^2 \quad (1.10)$$

representando mediante $\varepsilon()$ valores estimados del valor real y mediante \underline{I}_N la matriz identidad $N \times N$, entonces bajo la suposición de que el modelo matemático expresado por la ecuación 1.8 representa la verdadera situación, los estimados \underline{B} de los coeficientes $\underline{\beta}$, ($\varepsilon(\underline{B}) = \underline{\beta}$) caren-

rentes de sesgo y con varianza mínima, son aquellos que reducen al mínimo la suma de cuadrados $(\underline{Y}-\underline{Y})'(\underline{Y}-\underline{Y})$ de las diferencias entre los valores observados \underline{Y} , y los valores \underline{Y} dados por la ecuación ajustada ($\underline{Y} = \underline{X}\underline{B}$). Estos son los coeficientes estimados por mínimos cuadrados y en notación matricial vienen dados por la ecuación:

$$\underline{B} = (\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{X}'\underline{Y} = \underline{T}\underline{Y} \quad (1.11)$$

siendo \underline{T} la denominada matriz de transformación del diseño, ($\underline{T} = (\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{X}'$). Sus varianzas y covarianzas son los elementos de la matriz:

$$\epsilon(\underline{B}-\underline{\beta})(\underline{B}-\underline{\beta})' = (\underline{X}'\underline{X})^{-1}\sigma^2 \quad (1.12)$$

y una estimación de la varianza del error viene dada por la ecuación:

$$(\underline{Y}-\underline{Y})'(\underline{Y}-\underline{Y}) = \underline{Y}'\underline{Y}-\underline{B}'\underline{X}'\underline{X}\underline{B} \quad (1.13)$$

Si contrariamente a lo supuesto el modelo matemático expresado mediante la ecuación 1.8 es inadecuado, y son necesarios L_1 términos adicionales $\underline{X}_1\underline{\beta}_1$ para asegurar una representación adecuada de la respuesta, entonces:

$$\underline{\eta} = \underline{X}\underline{\beta} + \underline{X}_1\underline{\beta}_1 \quad (1.14)$$

y los estimados dados por la ecuación 1.10 vienen sesgados por

$$\epsilon(\underline{B}) = \underline{\beta} + \underline{A}\underline{\beta}_1 \quad (1.15)$$

en donde $\underline{A} = (\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{X}'\underline{X}_1$ es la matriz $L \times L_1$ de los coeficientes de sesgo y se denomina matriz de sesgo. La suma de cuadrados resulta igualmente sesgada cuando el modelo expresado en la ecuación 1.8 no es satisfactorio:

$$\begin{aligned}
 \epsilon(\underline{Y}'\underline{Y}-\underline{B}'\underline{X}'\underline{X}\underline{B}) &= (N-L)\sigma^2 + \\
 + \underline{\beta}'_1(\underline{X}_1-\underline{X}\underline{A})'(\underline{X}_1-\underline{X}\underline{A})\underline{\beta}_1 &= (N-L)\sigma^2 + \\
 + \underline{\beta}'_1\underline{X}'_1(\underline{I}_N-\underline{X}(\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{X}')\underline{X}_1\underline{\beta}_1 & \quad (1.16)
 \end{aligned}$$

1.2.4- LA MATRIZ MOMENTO DEL DISEÑO

La matriz $\underline{X}'\underline{X}$ que figura en las ecuaciones anteriores, contiene sumas y productos de las variables independientes. Por tanto la matriz $N^{-1}(\underline{X}'\underline{X})$ puede ser considerada como una matriz de momentos del diseño.- Por ejemplo, si se ajusta para $k=2$ la ecuación de segundo grado:

$$\begin{aligned}
 \eta &= \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \\
 &+ \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{12} x_1 x_2 \quad (1.17)
 \end{aligned}$$

la matriz $N^{-1}(\underline{X}'\underline{X})$ será la expresada en la ecuación 1.18. Las cantidades encerradas entre barras en dicha ecuación representan los momentos del diseño. Así, por ejemplo, $|11| = N^{-1}(x_{11}^2 + x_{12}^2 + \dots + x_{1N}^2)$, $|2| = N^{-1}(x_{21} + x_{22} + \dots + x_{2N})$, etc..

La matriz $N^{-1}(\underline{X}'\underline{X})$ se denomina matriz momento, mientras que su inversa, $N(\underline{X}'\underline{X})^{-1}$, matriz que representa las varianzas y covarianzas de los efectos referidas a una base relativa al número de observaciones, -- cuando la varianza del error es la unidad, se denomina matriz de precisión del diseño.

Las matrices de sesgo \underline{A} , y de precisión $N(\underline{X}'\underline{X})^{-1}$, constituyen una base adecuada para la compara-

$$N^{-1}(\underline{X}'\underline{X}) =$$

	0	1	2	11	22	12
0	1	1	2	11	22	12
1	1	11	12	111	122	112
2	2	12	22	112	222	122
11	11	111	112	1111	1122	1112
22	22	122	222	1122	2222	1222
12	12	112	122	1112	1222	1122

Matriz momento

Ecuación 1.18

ción de diseños sujetos a los convenios representados -- por las ecuaciones 1.2 y 1.3.

1.2.5.- DISEÑOS ORTOGONALES

Un diseño k-dimensional se dice que es ortogonal, cuando la matriz momento $N^{-1}(\underline{X}'\underline{X})$ considerada -- en el subapartado anterior, es diagonal. La importancia de la ortogonalidad reside principalmente en dos hechos:

a) Una gran facilidad en el cálculo necesario para la estimación de los coeficientes. En efecto, la matriz de transformación T es muy simple, al provenir de la matriz inversa de X'X.

b) Los coeficientes β se estiman independientemente y con varianzas mínimas (24),(25),(26), (27).

Los diseños de primer orden, es decir los diseños cuyas variables independientes son x_1, x_2, \dots, x_k sujetas a las convenciones adoptadas (ecuaciones 1.2 y 1.3), con una matriz de diseño D cuyas columnas son ortogonales entre sí, o sea con el sumatorio

$$\sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju}$$

nulo para cualquier par de valores distintos para i y j entre 1 y k, son todos ellos ortogonales. La matriz de transformación T es, en este caso, particularmente sencilla: $\underline{T} = N^{-1}\underline{X}'$.

Los diseños de orden superior al primero contienen variables cuadráticas o de mayor orden, que no son funcionalmente independientes. Este hecho hace que sea imposible el obtener una matriz momento diagonal, ya

que siempre existirán sumatorios del tipo

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2, \quad \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_0, \quad$$

los cuales no serán nulos a menos que lo sean las coordenadas de todos los puntos experimentales.

Sin embargo, es posible ortogonalizar el diseño redefiniendo las variables en términos de polinomios ortogonales. El polinomio ortogonal de orden m -ésimo para la variable i -ésima, se define como:

$$x_i^{(m)} = x_i^m + \alpha_{m-1,m} x_i^{m-1} + \dots + \alpha_{1,m} x_i + \alpha_{0,m} \quad (1.19)$$

donde las α se eligen de forma tal que los m sumatorios que a continuación se expresan sean nulos:

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^{(m)} x_{iu}^{(m-p)} = 0 \quad (p = 1, 2, \dots, m) \quad (1.20)$$

De esta forma los $\binom{k+d}{d}$ polinomios originales, en notación matricial, y en función de los polinomios ortogonales -- así definidos serán:

$$\eta = (\underline{X}\underline{P})(\underline{P}^{-1}\underline{\beta}) = \underline{X}\underline{\beta} \quad (1.21)$$

donde \underline{P} es la matriz que transforma las antiguas variables independientes en las nuevas, mientras que \underline{X} y $\underline{\beta}$ representan respectivamente la matriz de las nuevas variables ortogonales y el vector de los coeficientes ligados a estas nuevas variables. El diseño será elegido de forma conveniente para que \underline{X} sea diagonal, y los coeficientes $\underline{\beta}$ se obtendrán a partir de la matriz \underline{P} :

$$\underline{\beta} = \underline{P}\underline{\beta} \quad (1.22)$$

Aunque el proceso pueda parecer algo complicado, esto no es así, ya que en la mayoría de los casos la matriz P será extremadamente simple, y la ortogonalización del diseño será por consiguiente muy sencilla.

La ortogonalidad implica una gran simplificación en el cálculo, pero debe tenerse en cuenta que está referida a una orientación particular del diseño y que esta propiedad se pierde en general al cambiar dicha orientación. Si se supone, por ejemplo, que la superficie de respuesta viene representada localmente por una ecuación de segundo orden, y se refiere el conjunto de cónicas por ella engendrado a sus ejes principales, la orientación de dichos ejes respecto a los del diseño, diferirá de un problema a otro. Se puede comprobar además que las varianzas de los coeficientes estimados de segundo orden, así como las correlaciones entre los mismos aumentan de acuerdo con una función trigonométrica, al hacer girar el diseño. Puesto que en principio nada se conoce acerca de la orientación de la superficie de respuesta se puede concluir que la precisión con que un diseño ortogonal de orden superior al primero estima los coeficientes constituye una propiedad un tanto ficticia.

1.2.6.- FUNCION VARIANZA Y DISEÑOS ROTATORIOS

Una función característica de los diseños experimentales es la llamada función varianza.(10).

Si se designa mediante el vector x ($k \times 1$) las k coordenadas x_1, x_2, \dots, x_k , de un punto en el espacio k -dimensional, y por \hat{y}_x la respuesta estimada en este punto mediante un polinomio ajustado por mínimos cua-

drados a las N observaciones de cierto diseño experimental, la varianza $V(\hat{y}_x)$ de este valor estimado, será una función de \underline{x} y de σ^2 , la varianza del error experimental. Puesto que al incrementar N se reduce $V(\hat{y}_x)$, la función $V(\underline{x}) = NV(\hat{y}_x)/\sigma^2$, denominada función varianza o bien su inversa $W(\underline{x}) = \sigma^2/NV(\hat{y}_x)$, constituyen una referencia estandarizada de la precisión con la cual un diseño de matriz \underline{D} estima la respuesta en el punto \underline{x} . En efecto, como se podrá comprobar en la ecuación 1.26, la función varianza depende únicamente del punto particular considerado y de la matriz de precisión.

Debido al desconocimiento que se posee acerca de la orientación de la superficie de respuesta, - parece oportuna la adopción de diseños con una distribución esférica de la varianza de las respuestas estimadas, es decir, diseños tales en que esta varianza sea constante en todos los puntos que equidisten del origen del diseño. Un diseño k -dimensional cuyos contornos de varianza en el espacio sean círculos, esferas o hiperesferas, centradas en el origen del mismo, se denomina diseño rotatorio. Para tal diseño, la varianza de las respuestas estimadas por el polinomio ajustado es, por consiguiente, una función sólo de la distancia del punto considerado - al centro del diseño.

1.2.7.- CONDICIONES PARA QUE UN DISEÑO SEA ROTATORIO

Si se considera la respuesta \hat{y}_x estimada por un polinomio de orden d ajustado por mínimos cuadrados, en el punto cuyas coordenadas vienen dadas por los k últimos elementos del vector $\underline{x}' = (1, x_1, x_2, \dots, x_k)$ definido aquí como se observa con el elemento unidad adicional, se puede escribir:

$$\begin{aligned}\hat{y}_x = & b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_k x_k + \\ & + b_{11} x_1^2 + \dots + b_{kk} x_k^2 + \\ & + b_{12} x_1 x_2 + \dots + \\ & + b_{k-1,k} x_{k-1} x_k + \dots + \\ & + b_{111} x_1^3 + \dots \text{ etc.} \quad (1.23)\end{aligned}$$

que en notación vectorial equivale a:

$$\hat{y}_x = \underline{x}' |d| \underline{b} \quad (1.24)$$

donde $\underline{x}' |d|$ es el vector derivado de \underline{x}' de potencia d -- (28) y \underline{b} es el vector $\begin{pmatrix} k+d \\ d \end{pmatrix} \times 1$ que contiene todos los -- coeficientes b con multiplicadores adecuados de forma -- que la ecuación 1.24 sea equivalente a la 1.23.

Si la verdadera respuesta en este punto -- se representa por η_x entonces:

$$\eta_x = \underline{x}' |d| \underline{\beta} \quad (1.25)$$

y la varianza de la respuesta estimada $V(\hat{y}_x)$ será:

$$\begin{aligned}V(\hat{y}_x) &= \epsilon \{ (\hat{y}_x - \eta_x) (\hat{y}_x - \eta_x)' \} = \\ &= \underline{x}' |d| \epsilon \{ (\underline{b} - \underline{\beta}) (\underline{b} - \underline{\beta})' \} \underline{x}' |d| = \\ &= \underline{x}' |d| (\underline{X}' \underline{X})^{-1} \underline{x}' |d| \sigma^2 \quad (1.26)\end{aligned}$$

Si se considera la varianza de un segundo valor estimado \hat{y}_x en un punto situado a la misma distancia ρ del origen del diseño, y cuyas coordenadas son los últimos k elementos del vector $\underline{z} = \underline{R} \underline{x}$, donde \underline{R} es una matriz ortogonal --

$(k+1) \times (k+1)$, la cual consiste en una matriz ortogonal -- cualquiera \underline{H} , cuya primera fila es $\underline{u}' = (1, 0, \dots, 0)$ y su primera columna es \underline{u} . Sustituyendo en la ecuación 1.26 esta última igualdad, se tiene:

$$\begin{aligned} V(\hat{y}_{\underline{x}}) &= \underline{x}' |d| \underline{R}' |d| (\underline{X}' \underline{X})^{-1} \underline{R} |d| \underline{x} |d| \sigma^2 = \\ &= \underline{x}' |d| (\underline{R}' |d| \underline{X}' \underline{X} \underline{R} |d|)^{-1} \underline{x} |d| \sigma^2 \end{aligned} \quad (1.27)$$

donde $\underline{R} |d|$ es la d -ésima matriz de Schläflian (28).

Para satisfacer la condición de que la varianza sea constante en los puntos situados sobre hiperesferas centradas en el origen del diseño, es necesario que la ecuación 1.27 sea idéntica a la 1.26 para todo -- vector \underline{x} y para toda matriz ortogonal \underline{R} . Así pues:

$$\underline{X}' \underline{X} = \underline{R}' |d| \underline{X}' \underline{X} \underline{R} |d| \quad (1.28)$$

para cada matriz ortogonal \underline{R} . El segundo miembro de la ecuación 1.28 es N veces la matriz momento para el diseño de matriz \underline{HD} . Por consiguiente, la varianza será --- constante para cada punto situado a la misma distancia ρ del origen, siempre y cuando la matriz momento permanezca invariante bajo cualquier transformación ortogonal de la matriz de diseño \underline{D} .

1.2.8.- MOMENTOS DE UN DISEÑO ROTATORIO

Si por \underline{t}' se representa el vector $(k+1) \times 1$ $\underline{t}' = (1, t_1, t_1, \dots, t_k)$ se puede escribir una función polinomial Q generadora de los momentos hasta orden $2d$ del - diseño:

$$Q = N^{-1} \underline{t}, |d| \underline{X}, \underline{Xt} |d| \quad (1.29)$$

puesto que $x'_u = (1, x_{1u}, x_{2u}, \dots, x_{ku})$, $\underline{X}'\underline{X}$ será el sumatorio

$$\sum_{u=1}^N \underline{x}_u |d| \underline{x}'_u |d|$$

y por lo tanto:

$$\begin{aligned} Q &= N^{-1} \underline{t}, |d| \left(\sum_{u=1}^N \underline{x}_u |d| \underline{x}'_u |d| \right) \underline{t} |d| = \\ &= N^{-1} \sum_{u=1}^N (\underline{t}' \underline{x}_u \underline{x}'_u \underline{t})^d = N^{-1} \sum_{u=1}^N (1 + \\ &\quad + t_1 x_{1u} + t_2 x_{2u} + \dots + t_k x_{ku})^{2d} \end{aligned} \quad (1.30)$$

Si se representa por $|1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \dots, k^{\alpha_k}|$, al momento

$$N^{-1} \sum_{u=1}^N x_{1u}^{\alpha_1} x_{2u}^{\alpha_2} \dots x_{ku}^{\alpha_k}$$

el coeficiente de $t_1^{\alpha_1}, t_2^{\alpha_2}, \dots, t_k^{\alpha_k}$ en Q será:

$$\frac{(2d)!}{k \prod_{i=1}^k \alpha_i! (2d - \alpha)!} |1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \dots, k^{\alpha_k}| \quad (1.31)$$

en donde α es el orden del momento, $\alpha = \sum_{i=1}^k \alpha_i$.

De la ecuación 1.28 se deduce que el diseño es rotatorio si y sólo si :

$$\begin{aligned} Q &= N^{-1} \underline{t}, |d| \underline{X}, \underline{Xt} |d| = \\ &= N^{-1} \underline{t}, |d| \underline{R}, |d| \underline{X}, \underline{XR} |d| \underline{t} |d| = \end{aligned}$$

$$= N^{-1}(\underline{t}, \underline{R}') |d|_{\underline{X}, \underline{X}(\underline{R}\underline{t})} |d| \quad (1.32)$$

es decir si y sólo si cualquier transformación que deja invariante $\underline{t}'\underline{t}$ no hace variar a la función Q . Por consiguiente el diseño será rotatorio si y sólo si Q es una cierta función de $\underline{t}'\underline{t}$, y puesto que es un polinomio en \underline{t} , Q debe ser de la forma:

$$Q = \sum_{s=0}^d a_{2s} \left(\sum_{i=1}^k t_i^2 \right)^s \quad (1.33)$$

El coeficiente del término en $t_1^{\alpha_1}, t_2^{\alpha_2}, \dots, t_k^{\alpha_k}$ en esta expresión será nulo si cualquiera de las α_i es un entero impar. Si los α_i son pares, el coeficiente vendrá dado por:

$$\frac{a_{\alpha} (\alpha/2)!}{\prod_{i=1}^k (\alpha_i/2)!} \quad (1.34)$$

Igualando coeficientes a partir de las expresiones 1.31 y 1.34 se obtiene para los momentos de orden $2d$ e inferiores la ecuación:

$$|1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \dots, k^{\alpha_k}| = \frac{a_{\alpha} (\alpha/2)! (2d-\alpha)! \prod_{i=1}^k \alpha_i!}{2d! \prod_{i=1}^k (\alpha_i/2)!} \quad (1.35)$$

haciendo

$$\lambda_{\alpha} = \frac{a_{\alpha} 2^{\alpha/2} (\alpha/2)! (2d-\alpha)!}{2d!} \quad (1.36)$$

se tiene para los momentos de un diseño rotatorio de or-

den d:

$$|1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \dots, k^{\alpha_k}| = 0 \quad (1.37)$$

si una o varias α_i son impares y:

$$|1^{\alpha_1}, 2^{\alpha_2}, \dots, k^{\alpha_k}| = \lambda_{\alpha} \frac{\prod_{i=1}^k \alpha_i!}{2^{\alpha/2} \prod_{i=1}^k (\alpha_i/2)!} \quad (1.38)$$

si todas las α_i son pares.

1.2.9.- EFECTO DE TRANSFORMACIONES SOBRE MOMENTOS NULOS

Se puede comprobar fácilmente que si una transformación lineal transforma las variables x_1, x_2, \dots, x_k a otras nuevas X_1, X_2, \dots, X_k , los momentos de orden α para estas nuevas variables, serán combinación lineal de los momentos de orden α de las antiguas variables. En particular, los momentos que anteriormente eran nulos, lo seguirán siendo después de la transformación.

La importancia de este hecho radica en -- que en la matriz de sesgo \underline{A} de un diseño de orden d intervienen los momentos de orden $2d+1$, y si estos son nulos en una orientación particular, lo son en todas las demás.

1.2.10.- DISEÑOS ROTATORIOS

En los apartados que siguen se estudian con cierto detalle los distintos tipos de diseños rotatorios, así como

las propiedades que los caracterizan.

1.2.10.1.- Matriz momento y de sesgo

Las ecuaciones derivadas en el apartado 1.2.8. muestran que la matriz momento para un diseño rotatorio se conoce perfectamente salvo ciertas constantes arbitrarias $\lambda_0, \lambda_2, \dots, \lambda_{2d}$. Por consiguiente para este tipo de diseño depende exclusivamente de dichas constantes y del radio $\rho = (\underline{x}'\underline{x})^{1/2}$. Estudiando detenidamente la variación de $V(\underline{x})$ en función de las λ y de ρ , se pueden determinar valores convenientes de las primeras a fin de obtener una función varianza y una matriz de sesgo - ésta depende asimismo de las λ - satisfactorias. A este respecto debe ser puesto de manifiesto que la matriz de sesgo puede ser expresada completamente en función de las λ y de los momentos de orden $2d+1$. Por tanto en cuanto sea posible se utilizarán diseños tales que dichos momentos sean nulos (recuérdese en este punto lo expuesto en el apartado anterior, esto es, que si son nulos en una orientación, lo son en todas las demás), siendo el sesgo, por consiguiente, función exclusiva de las λ .

1.2.10.2.- Diseños rotatorios de primer orden

Si se desea ajustar un polinomio de orden $d = 1$, a una serie de k variables x_1, x_2, \dots, x_k , es decir obtener la ecuación representativa de un hiperplano

$$y_x = b_0 + b_1x_1 + \dots + b_kx_k \quad (1.39)$$

mediante un diseño de primer orden rotatorio, sujeto a -

los convenios adoptados en el apartado 1.2.1., se obtendrán los siguientes momentos (ecuaciones 1.37 y 1.38):

a) de primer orden

- del tipo $|i| = 0$ ($i=0,1,\dots,k$)

- del tipo $|ij| = 0$ ($i \neq j$)
($i,j=0,\dots,k$)

b) de segundo orden

- del tipo $|ii| = \lambda_2 = 1$
($i=0,1,\dots,k$)

Es decir, no hay elección posible para el valor de λ , y la matriz momento resulta ser la matriz identidad:

$$N^{-1} \underline{X}' \underline{X} = \underline{I}_{k+1} \quad (1.40)$$

La condición para que un diseño de primer orden sea rotatorio es precisamente la misma para que sea ortogonal.

La condición de ser rotatorio el diseño, hace asimismo que la función varianza sea de la forma:

$$V(\underline{x}) = NV(\hat{y}_x)/\sigma^2 = 1 + \rho^2 \quad (1.41)$$

donde $\rho = \left(\sum_{i=1}^k x_i^2 \right)^{1/2}$, e indica que la varianza de una -

respuesta estimada aumenta de forma cuadrática al alejar el punto considerado del centro del diseño.

Si el modelo de primer orden resulta inadecuado, los coeficientes estimados estarán sesgados por los supuestos nulos de segundo orden, de acuerdo con las siguientes ecuaciones derivadas de la matriz de sesgo:

$$\epsilon(b_0) = \beta_0 + \lambda_2 \sum_{g=1}^k \beta_{gg}$$

$$\epsilon(b_i) = \beta_i + \sum_{g=1}^k \sum_{h=g}^k |ghi| \beta_{gh} \quad (1.42)$$

Si se selecciona un diseño tal que los momentos del tipo $|ghi|$ sean nulos se obtendrán estimados sin sesgo de los β_i .

Como ya se ha mencionado, cualquier diseño ortogonal de orden uno, constituye un diseño rotatorio del mismo orden. De esta forma todas las figuras regulares en los distintos espacios k -dimensionales, dan lugar a diseños adecuados. Así en dos dimensiones ($k=2$) se pueden considerar los siguientes:

- Triangulo (tres puntos experimentales). Constituye el diseño Simplex para $k=2$.
- Cuadrado (cuatro puntos experimentales). Constituye el diseño factorial para $k=2$.
- Pentágono (cinco puntos experimentales).
- Hexágono (seis puntos experimentales).
- Etc.

pudiéndose añadir cualquier número de puntos centrales.

En el espacio tridimensional ($k=3$) sólo existen cinco figuras regulares:

- Tetraedro (cuatro puntos experimentales). Constituye el diseño Simplex

plex para $k=3$.

- Octaedro (seis puntos experimentales).
- Hexaedro (ocho puntos experimentales). Constituye el diseño factorial completo para $k=3$.
- Icosaedro (doce puntos experimentales).
- Dodecaedro (veinte puntos experimentales).

e igualmente resulta posible adicionar cualquier número de puntos centrales.

Para espacios k -dimensionales, $k \geq 4$, solamente existen tres figuras regulares:

- Figura análoga al tetraedro ($k+1$ puntos experimentales). Constituye el diseño Simplex en el espacio k -dimensional.
- Figura análoga al octaedro ($2k$ puntos experimentales).
- Figura análoga al hexaedro (2^k puntos experimentales). Constituye el diseño factorial completo en el espacio de k dimensiones.

Naturalmente pueden utilizarse fracciones adecuadas del diseño factorial(29),(30). Como antes, se pueden adicion

nar el número de puntos centrales que se crea conveniente.

En el espacio de cuatro dimensiones existen además dos figuras regulares adicionales con 120 y 600 vértices cada una de ellas. Su interés es, no obstante escaso, debido al elevado número de puntos experimentales.

1.2.10.2.1.- Coeficientes de la ecuación

La estimación de los coeficientes de la ecuación que se obtiene a partir de un diseño rotatorio de primer orden es extremadamente simple por el hecho de ser ortogonal.

Los estimados b_i de la ecuación 1.39, obtenidos por mínimos cuadrados, se derivan de la ecuación 1.11 con la condición de ortogonalidad expresada en la ecuación 1.40. De esta forma se puede escribir:

$$b_i = \frac{\sum_{u=1}^N y_u x_{iu}}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2} \quad i=1, \dots, k \quad (1.43)$$

Por otra parte, ésta ecuación es igualmente útil para $i=0$, es decir para b_0 , dado el convenio de adoptar $x_0=1$.

La varianza de los coeficientes b_i , $V(b_i)$ viene dada sencillamente por la siguiente ecuación:

$$V(b_i) = \sigma^2/N \quad (1.44)$$

1.2.10.2.2.- Análisis de varianza

La suma de cuadrados total $S = y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_N^2$, con N grados de libertad, puede ser dividida en dos partes, la suma de cuadrados S_{01} debida al ajuste de la ecuación de primer orden, con $k+1$ grados de libertad y la suma residual de cuadrados R obtenida por diferencia entre las dos primeras, con $N-k-1$ grados de libertad:

$$R = S - S_{01} \quad (1.45)$$

La suma de cuadrados debida a la regresión puede ser subdividida en sumas de cuadrados debidas a los coeficientes particulares:

$$S_{01} = \sum_{i=0}^k S_i \quad (1.46)$$

siendo cada S_i :

$$S_i = \frac{\left(\sum_{u=1}^N x_{iu} y_u \right)^2}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2} \quad (1.47)$$

Si se dispone de una estimación del error experimental - se podrán efectuar tests adecuados para el estudio de la significación de la ecuación así como de los coeficientes que intervienen en la misma (31),(32),(33),(Apéndice 1).

1.2.10.3.- Diseños rotatorios de segundo orden

Si el polinomio que se desea ajustar es de segundo orden ($d=2$), es decir, si se desea obtener --

una ecuación del tipo:

$$\begin{aligned}
 y_x = & b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_k x_k + \\
 & + b_{11} x_1^2 + \dots + b_{kk} x_k^2 + \\
 & + b_{12} x_1 x_2 + \dots + b_{k-1,k} x_{k-1} x_k \quad (1.48)
 \end{aligned}$$

mediante un diseño de segundo orden sujeto a los convenios adoptados en el apartado 1.2.1., se obtendrá a partir de la ecuación 1.38 la matriz momento que figura en la ecuación 1.49, la cual posee todos los momentos impares nulos y los momentos pares con los siguientes valores:

$$\begin{aligned}
 |ii| &= 1 \\
 |iijj| &= \lambda_u \\
 |iiii| &= 3\lambda_u \quad (1.50)
 \end{aligned}$$

La matriz de precisión, inversa de la anterior está expresada en la ecuación 1.51 en donde

$$a = 2\lambda_u(k+2) \quad (1.52)$$

$$b = -2\lambda_u A \quad (1.53)$$

$$c = \lambda_u^{-1} \quad (1.54)$$

$$d = \{(k+1)\lambda_u - (k-1)\}A \quad (1.55)$$

$$e = (1-\lambda_u)A \quad (1.56)$$

$$y \quad A = \{2\lambda_u((k+2)\lambda_u - k)\}^{-1} \quad (1.57)$$

Por consiguiente las varianzas y covarianzas de los coeficientes estimados mediante un diseño rotatorio de segun

$$N^{-1}(\bar{X}'\bar{X}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & \dots & k & 11 & 22 & \dots & kk & 12 & 13 & \dots & k-1, k \\ \hline 0 & 1 & & & * & 1 & 1 & \dots & 1 & & & * \\ 1 & & 1 & & & & & & & & & \\ 2 & & & 1 & & & & & & & & \\ \vdots & & & & \vdots & & & & & & & \\ k & & & & & 1 & & & & & & \\ \hline 11 & 1 & & & & 3\lambda_4 & \lambda_4 & \dots & \lambda_4 & & & \\ 22 & 1 & & & & \lambda_4 & 3\lambda_4 & \dots & \lambda_4 & & & \\ \vdots & \vdots & & & * & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & & \\ k-1, k & 1 & & & & \lambda_4 & \lambda_4 & \dots & 3\lambda_4 & & & \\ \hline 12 & & & & & & & & & \lambda_4 & \lambda_4 & \\ 13 & & & & & & & & & & & \\ \vdots & & & & & & & & & & & \\ k-1, k & & & & & & & & & & & \lambda_4 \end{bmatrix}$$

Ecuación 1.49 (Los asteriscos representan submatrices nulas)

$$N(\bar{X}'\bar{X})^{-1} =$$

0	1	2	...	k	11	22	...	kk	12	13	...	k-1,k
a	*				b	b	...	b				*
1	1											
2		1										
...			.				*				*	
...				.								
...				.								
k				1								
11	b				d	e	...	e				
22	b				e	d	...	e				
...			*	
...	.			*				
...				
kk	b				e	e	...	d				
12									c			
13										c		
...	*							*			.	
...											.	
k-1,k											.	c

Ecuación 1.51 (Los asteriscos representan submatrices nulas)

do orden vendrán dadas por:

$$V(b_0) = 2\lambda_4^2(k+2)A\sigma^2/N \quad (1.58)$$

$$V(b_i) = \sigma^2/N \quad (1.59)$$

$$V(b_{ii}) = \{(k+1)\lambda_4 - (k-1)\}A\sigma^2/N \quad (1.60)$$

$$V(b_{ij}) = \lambda_4^{-1}\sigma^2 \quad (1.61)$$

$$\text{Cov}(b_0, b_{ii}) = -2\lambda_4 A\sigma^2/N \quad (1.62)$$

$$\text{Cov}(b_{ii}, b_{ij}) = (1-\lambda_4)A\sigma^2/N \quad (1.63)$$

siendo las demás covarianzas nulas. Haciendo $\lambda_4=1$, se observa que desaparecen las covarianzas de los coeficientes cuadráticos, es decir se ortogonaliza el diseño.

Por tanto para un diseño ortogonal y rotatorio de segundo orden se tendrá:

$$V(b_0) = (k+2)\sigma^2/2N \quad (1.64)$$

$$V(b_i) = \sigma^2/N \quad (1.65)$$

$$V(b_{ii}) = \sigma^2/2N \quad (1.66)$$

$$V(b_{ij}) = \sigma^2/N \quad (1.67)$$

$$\text{Cov}(b_0, b_{ii}) = -\sigma^2/2N \quad (1.68)$$

La función varianza para un diseño rotatorio vendrá dada según la ecuación 1.51 por:

$$\begin{aligned} V(\underline{x}) = NV(\hat{y}_x)/\sigma^2 = A\{2(k+2)\lambda_4^2 + \\ + 2\lambda_4(\lambda_4-1)(k+2)\rho^2 + ((k+1)\lambda_4 - (k-1))\rho^4\} \end{aligned} \quad (1.69)$$

donde igualmente $\rho = \left(\sum_{i=1}^k x_i^2 \right)^{1/2}$

En particular para un diseño ortogonal y rotatorio de segundo orden la ecuación 1.69 que define la función varianza se simplifica a:

$$V(\underline{x}) = (k+2+\rho^4)/2 \quad (1.70)$$

La figura 1.1 muestra una representación de la inversa de la función varianza $W(\rho)$, con λ_4 como parámetro, para el caso $k=2$. Se observará que la precisión decae rápidamente en cuanto ρ supera la unidad, con independencia del valor de λ_4 elegido.

Si el modelo de segundo orden resulta inadecuado, los coeficientes estimados estarán sesgados por los supuestos nulos de tercer orden, de acuerdo con las siguientes ecuaciones derivadas de la matriz de sesgo:

$$\varepsilon(b_0) = \beta_0 - \lambda_4^2 A \sum_{f=1}^k \sum_{g=f}^k \sum_{h=g}^k \sum_{i=1}^k |fghii| \beta_{fgh} \quad (1.71)$$

$$\varepsilon(b_i) = \beta_i + 3\lambda_4 \beta_{iii} + \lambda_4 \sum_{h \neq i}^k \beta_{hhi} \quad (1.72)$$

$$\varepsilon(b_{ii}) = \beta_{ii} + \{(k+2)\lambda_4 - k\} A |iiiiii| \beta_{iii} +$$

$$+ (1-\lambda_4) A \sum_{f=1}^k \sum_{g=f}^k \sum_{h=g}^k \sum_{i=1}^k |fghii| \beta_{fgh} \quad (1.73)$$

$$\varepsilon(b_{ij}) = \beta_{ij} + \lambda_4^{-1} \sum_{f=1}^k \sum_{g=f}^k \sum_{h=g}^k |fghij| \beta_{fgh} \quad (1.74)$$

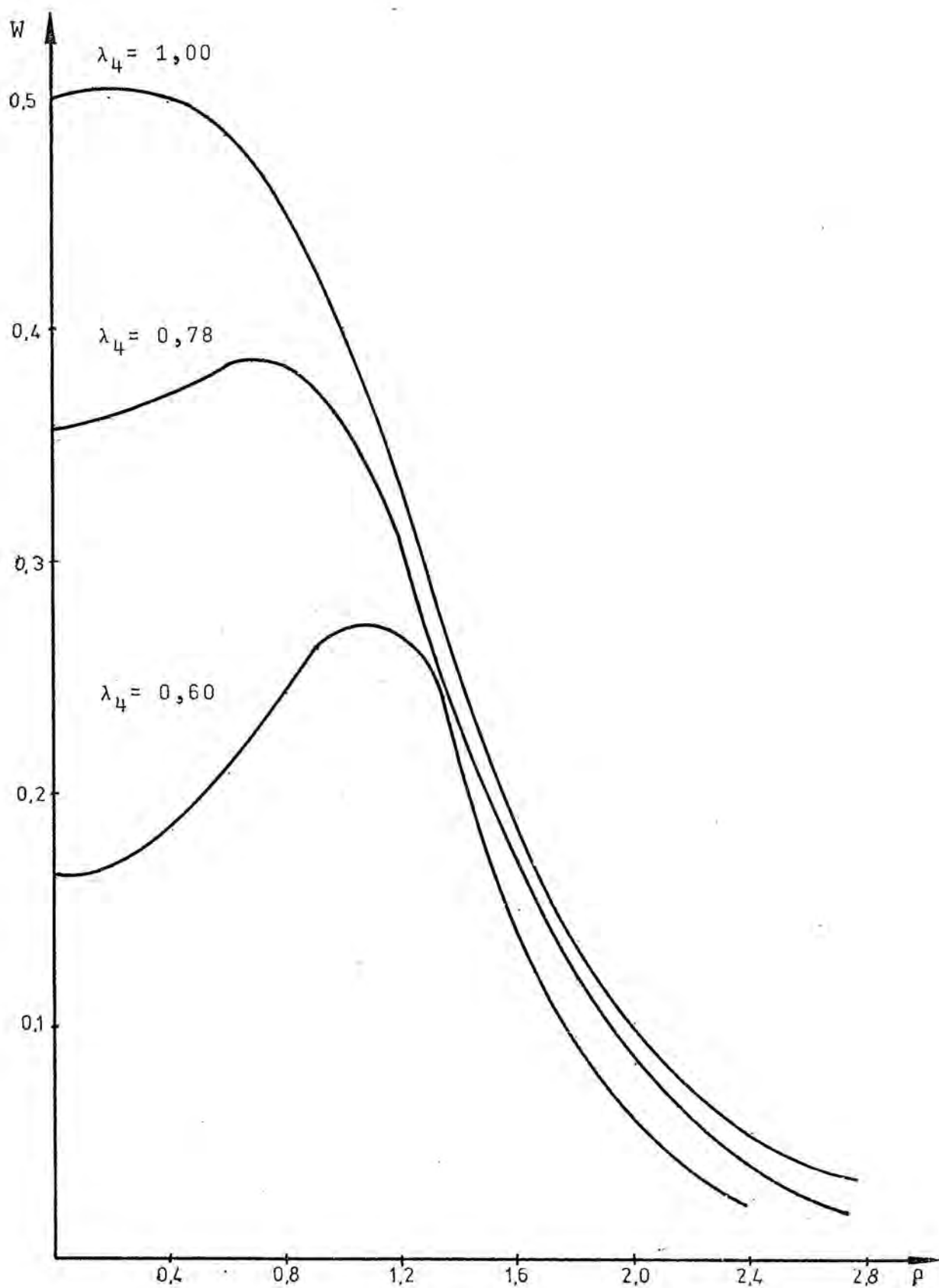


Figura 1.1

Función W para varios valores de λ_4 y para $k=2$

Se observa que seleccionando un diseño tal que los momentos de quinto orden sean nulos, desaparece gran parte -- de sesgo. No obstante existe un sesgo remanente directamente proporcional al valor de λ_4 . En la elección de λ_4 deberá tenerse en cuenta esta circunstancia junto con la relativa a la precisión de los estimados. Un valor de $\lambda_4=1$ conduce a un diseño ortogonal y a una alta precisión en los estimados (figura 1.1). Sin embargo el sesgo derivado de los posibles coeficientes de tercer orden es asimismo elevado.

El hecho de que un diseño rotatorio de orden d presente los momentos hasta el orden $2d$ idénticos a los de la función de distribución esférica, sugiere la obtención de diseños rotatorios por equiespaciado de puntos en una o más hiperesferas. (De hecho como puede -- comprobarse, los diseños de primer orden responden a este criterio).

Para la construcción de un diseño de segundo orden, es preciso considerar puntos experimentales situados equidistantemente en más de una hiperesfera, -- puesto que si se considera una sola entonces:

$$\rho^2 = \sum_{i=1}^k x_{iu}^2 = N^{-1} \sum_{u=1}^N \sum_{i=1}^k x_{iu}^2 = \sum_{i=1}^k |ii| = k \quad (1.75)$$

y, además:

$$\rho^4 = N^{-1} \sum_{u=1}^N \left(\sum_{i=1}^k x_{iu}^2 \right)^2 = \sum_{i=1}^k |iiii| + \sum_{i=1}^k \sum_{j \neq i}^k |ii jj| \quad (1.76)$$

de donde se deduce teniendo en cuenta la ecuación 1.50 -- que:

$$3k\lambda_4 + k(k-1)\lambda_4 = k^2 \quad (1.77)$$

y, por consiguiente:

$$\lambda_4 = k/(k+2) \quad (1.78)$$

Este valor denominado singular para λ_4 , sustituido en la ecuación 1.57 da lugar a que la varianza de los coeficientes $b_0, b_{11}, \dots, b_{kk}$, sea infinita (ecuaciones 1.58 y 1.60) por lo que no es posible la estimación independiente de estos coeficientes.

No obstante, sí constituyen diseños rotatorios de segundo orden, conjuntos de puntos equidistantes situados en dos o más hiperesferas.

Si se consideran s conjuntos equirradiales con el mismo origen, de modo que en el w -ésimo conjunto situado a la distancia ρ_w del origen haya n_w puntos, entonces, teniendo en cuenta que :

$$N = \sum_{w=1}^s n_w \quad (1.79)$$

se puede deducir una expresión para λ_4 .

En efecto, si se considera la expresión siguiente para el radio del w -ésimo conjunto,

$$\rho_w^2 = \left(\sum_{u=1}^{n_w} \sum_{i=1}^k x_{iu}^2 \right) / n_w \quad (1.80)$$

se deduce:

$$\sum_{w=1}^s n_w \rho_w^2 = \sum_{w=1}^s \sum_{u=1}^{n_w} \sum_{i=1}^k x_{iu}^2 = N \sum_{i=1}^k |ii| = Nk \quad (1.81)$$

Por otra parte:

$$\begin{aligned} n_w \rho_w^4 &= \sum_{u=1}^n \left(\sum_{i=1}^k x_{iu}^2 \right)^2 = \\ &= \sum_{u=1}^n \left\{ \left(\sum_{i=1}^k x_{iu}^2 \right) \left(\sum_{j=1}^k x_{ju}^2 \right) \right\} = \sum_{u=1}^n \left(\sum_{i,j} x_{iu}^2 x_{ju}^2 \right) \quad (1.82) \end{aligned}$$

y por lo tanto:

$$\begin{aligned} \sum_{w=1}^S n_w \rho_w^4 &= \sum_{w=1}^S \sum_{u=1}^n \left(\sum_{i,j} x_{iu}^2 x_{ju}^2 \right) = \sum_{i=1}^k N |iiii| + \\ &+ \sum_{i \neq j}^k N |iijj| = 3N\lambda_4 k + k(k-1)N\lambda_4 \quad (1.83) \end{aligned}$$

de donde:

$$\lambda_4 = \frac{\sum_{w=1}^S n_w \rho_w^4}{3Nk + k(k-1)N} = \frac{N \sum_{w=1}^S n_w \rho_w^4}{(k+2) \left(\sum_{w=1}^S n_w \rho_w^2 \right)^2} \quad (1.84)$$

Dado que un conjunto de puntos experimentales situados en el centro del diseño afecta únicamente al valor de N , la ecuación 1.84 puede ser empleada sin más modificación para diseños con un número determinado de replicaciones en el centro. Si se consideran n_1 puntos en el origen y n_2 en la hiperesfera de radio ρ_2 , se tendrá:

$$\lambda_4 = \frac{k(n_1 + n_2)}{(k+2)n_2} \quad (1.85)$$

Tras estas consideraciones se discuten --

los diseños rotatorios de segundo orden más usuales en los distintos espacios k -dimensionales (10).

i) Espacio bidimensional ($k=2$)

Están constituidos por dos o más anillos concéntricos de puntos equidistantes. El caso más frecuente es el de n_2 puntos situados en una circunferencia de radio ρ_2 , siendo $n_2 \geq 5$, y n_1 puntos situados en el centro del diseño ($\rho_1=0$).

Cuando n_1 es igual a n_2 , siendo $k=2$, λ_4 toma el valor unidad en la ecuación 1.85 y el diseño además de rotatorio es ortogonal. Un valor de $\lambda_4=0,78$, obtenido a partir de la ecuación 1.69 haciendo coincidir las varianzas de los estimados para $\rho=0$ y $\rho=1$, conduce a una distribución más uniforme de la varianza dentro del diseño (figura 1.1) y a un menor sesgo en los coeficientes que se estiman. Es este pues un valor recomendable a usar en este tipo de diseños. Valores de λ_4 cercanos al especificado, se obtienen adicionando $n_1=3$ puntos centrales, cuando $n_2=5$ (pentágono), o $n_2=6$ (hexágono). Para otros polígonos se obtienen valores de n_1 adecuados mediante la ecuación 1.85.

Especial mención debe hacerse de los octógonos con ocho puntos centrales como caso especial de los diseños factoriales compuestos introducidos por Box y Wilson y que han sido ampliamente utilizados (8),(34).

ii) Espacio tridimensional ($k=3$)

En el espacio tridimensional, los vértices de cinco figuras regulares - tetraedro ($N=4$), octaedro ($N=6$), hexaedro ($N=8$), icosaedro ($N=12$), y dodecaedro ($N=20$) - proporcionan conjuntos de puntos equiespa-

ciados en una esfera. Como era de esperar, los vértices del tetraedro, octaedro y hexaedro no constituyen individualmente, diseños rotatorios de orden dos. No obstante sí lo constituyen los de un icosaedro o un dodecaedro debido a su mayor número de puntos experimentales. En ambas figuras evidentemente, se les debe añadir un número de puntos centrales, al objeto de que λ_4 no adquiera el valor singular.

Al igual que antes, para obtener otros tipos de diseños rotatorios, es posible combinar icosaedros y dodecaedros de diferentes radios ρ_1 y ρ_2 en cualquier orientación absoluta y relativa. El valor de λ_4 queda determinado en todos los casos por medio de la ecuación 1.84, una vez conocidos n_1 y n_2 , y la razón de radios ρ_1/ρ_2 .

Igualmente que en los diseños de dos dimensiones, pueden obtenerse diseños rotatorios de orden dos, por combinación de diseños no rotatorios de orden dos en sí mismos, y que se comentan en el subapartado siguiente iii).

iii) Espacios k-dimensionales ($k \geq 4$)

Se pueden obtener diseños rotatorios en espacios de dimensiones superiores a la tercera, por combinación de los vértices de un hipercubo con los de la figura análoga al octaedro, cada uno con la orientación estándar, esto es, un cubo de coordenadas

$$(\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)$$

y la figura análoga al octaedro con coordenadas

$$(\pm \alpha, 0, \dots, 0), (0, \pm \alpha, \dots, 0), \dots, (0, 0, \dots, \pm \alpha)$$

Teniendo en cuenta que el factor de escala c es

$$c = N/(2^k + 2k\alpha^2) \quad (1.86)$$

mediante la ecuación 1.84 es posible deducir la relación de radios ρ_a/ρ_c para que el diseño sea rotatorio, obteniéndose:

$$\rho_a/\rho_c = 2^{k/4}/k^{1/2} \quad (1.87)$$

siendo ρ_a el radio de la figura análoga al octaedro con $\alpha=2^{k/4}$ y ρ_c el radio del hipercubo. Por adición de puntos centrales, pueden seleccionarse valores adecuados para λ_4 (ecuación 1.84). Especialmente interesantes son los valores de λ_4 unidad - diseño ortogonal - y los expresados en la tabla 1.1 que son los que proporcionan una distribución más uniforme de la varianza dentro del diseño.

Tabla 1.1

Valores requeridos para que la varianza para $\rho=1$ sea la misma que para $\rho=0$

k	2	3	4	5	6	7
λ_4	0,784	0,838	0,870	0,892	0,907	0,918

Este tipo de diseño, válido para todas --

las dimensiones, es el denominado diseño factorial compuesto, y es de suma utilidad al permitir una investigación de tipo secuencial. En efecto, si una vez construido el hipercubo, es decir si una vez completado el diseño 2^k factorial, el análisis de varianza mostrara que el modelo lineal no es adecuado, pueden ser añadidos $2k$ puntos adicionales denominados axiales por situarse a lo largo de los ejes del diseño, para completar el diseño anteriormente expuesto.

Para espacios de dimensión suficientemente elevada, $k \geq 5$, pueden utilizarse fracciones apropiadas del diseño 2^k factorial, de modo que las interacciones de segundo orden no estén confundidas entre si (29), (30) (32), es decir que al añadir los vértices de la figura análoga al octaedro, resulte una matriz momento correspondiente a un diseño rotatorio (ecuación 1.49). No obstante, el sesgo de los coeficientes estimados, será generalmente mayor al no ser nulos los momentos de quinto orden (ecuaciones 1.71, 1.73 y 1.74).

La tabla 1.2 muestra un resumen de los diferentes diseños factoriales compuestos rotatorios posibles en los distintos espacios k -dimensionales. Se incluyen los valores de λ_4 unidad - diseño ortogonal - y los correspondientes a la tabla 1.1, que proporcionan una distribución más uniforme de la varianza dentro del diseño. La nomenclatura que se sigue es la siguiente:

n_c número de puntos correspondientes al diseño 2^k factorial o fraccionado apropiado, con coordenadas $(\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)$.

n_a número de puntos axiales correspondientes a los vértices de la figura

Diseños factoriales compuestos rotatorios y rotatorios-ortogonales

k	2	3	4	5	5 $\frac{1}{2}$	6	6 $\frac{1}{2}$	7	7 $\frac{1}{2}$	8	8 $\frac{1}{2}$	8 $\frac{1}{4}$
n _c	4	8	16	32	16	64	32	128	64	256	128	64
n _a	4	6	8	10	10	12	12	14	14	16	16	16
n ₀ (Tabla 1.1)	5	6	7	10	6	15	9	21	14	28	20	13
n ₀ (Ortogonal)	8	9	12	17	10	24	15	35	22	52	33	20
N (Tabla 1.1)	13	20	31	52	32	91	53	163	92	300	164	93
N (Ortogonal)	16	23	36	59	36	100	59	177	100	324	177	100
α = n _c ^{1/4}	1,414	1,682	2,000	2,378	2,000	2,828	2,378	3,364	2,828	4,000	3,364	2,828
λ ₄ (Tabla 1.1)	0,81	0,86	0,86	0,89	0,89	0,91	0,90	0,92	0,92	0,93	0,93	0,93
λ ₄ (Ortogonal)	1,00	0,99	1,00	1,01	1,00	1,00	1,01	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
ρ _a /ρ _c	1,000	0,971	1,000	1,064	0,894	1,155	0,971	1,271	1,069	1,414	1,189	1,000

Tabla 1.2

ra análoga al octaedro, con coordenadas $(\pm\alpha, 0, \dots, 0), (0, \pm\alpha, \dots, 0), \dots, (0, 0, \dots, \pm\alpha)$.

n_0 número de puntos en el centro del diseño, con coordenadas $(0, 0, \dots, 0)$.

En todos los casos α , coordenada axial, tiene el valor de $n_c^{1/4}$, como corresponde a un diseño rotatorio, con un factor de escala $c = N/(n_c + 2n_c^{1/2})$,

Además de los hasta aquí expuestos, han sido propuestos numerosos tipos de diseños rotatorios de segundo orden, (11), (12), (13), (14), (15), (16), (17), (18), - (19).

Bose y Draper (11), (13), derivan un nuevo método de construcción basándose en el estudio de la diferencia entre los momentos puros de cuarto orden

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^4$$

y los mixtos del mismo orden

$$\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2$$

Esta diferencia a la que denominan función exceso debe ser nula en un diseño rotatorio. Los conjuntos de puntos a los que se aplica esta función, forman parte del grupo simétrico derivado de considerar todas las permutaciones de las k coordenadas de un punto cualquiera (x_1, x_2, \dots, x_k) en el espacio k -dimensional, junto con todas las combinaciones de signos de estas k coordenadas. Resulta así un conjunto de $2^k k!$ puntos, aunque únicamente se consideran subconjuntos en los que sólo tres de las k coordenadas son distintas, ya que de lo contrario el -

número total de puntos resulta excesivo.

Las tablas 1.3 y 1.4 resumen este tipo de diseños cuyo interés es más teórico que práctico. Los conjuntos de puntos S_i utilizados en la tabla 1.4 son los siguientes:

$$S_1 : \{(\pm a, \pm a, \dots, \pm a)\}$$

$$S_2 : \{(\pm c, 0, \dots, 0) \text{ y permutaciones}\}$$

$$S_3 : \{(0, \pm f, \dots, \pm f) \text{ y permutaciones}\}$$

$$S_4 : \{(\pm p, \pm p, 0, \dots, 0, 0) \text{ y permutaciones}\}$$

$$S_5 : \{(\pm p, \pm p, \dots, \pm p, 0, 0) \text{ y permutaciones}\}$$

Basado en consideraciones análogas, Thacker (14), obtiene nuevos diseños rotatorios de segundo orden, aunque el número de puntos experimentales precisos resulta ser también comparativamente excesivo.

Otro enfoque distinto es el que aplican Box y Behnken (12) para derivar los diseños que denominan "Simplex - Sum". Se basan en los diseños Simplex de primer orden, obteniéndose los "Simplex - Sum" sumando vectorialmente y de todas las formas posibles los $k+1$ vértices del Simplex ; primeramente considerados de uno en uno, a continuación de dos en dos, y así sucesivamente hasta la suma de $k+1$ en $k+1$, una única suma que conduce obviamente a las coordenadas del punto central. Por consiguiente el número de puntos no centrales para los diseños "Simplex - Sum" es de $2^{k+1} - 2$. Cada grupo de vectores obtenido sumando de todas las formas posibles los vectores del Simplex, está multiplicado por un coeficiente a_s adecuado para que el diseño sea rotatorio. Así, si mediante \underline{D}_s se designa la matriz de diseño del

(x^+, b^+, d^+)	$(+p, +q, 0)$	$(+a, +a, +a)$	$(0, 0, 0)$	No pto. tot. (N-N ₀)	Rango de los parámetros y valores de las coordenadas en función de los mismos, para que el diseño sea rotatorio			Valor de λ_4/λ_2^2
24	12	8	6		$0 \leq t \leq (3-\sqrt{5})/2$ $t \geq (3+\sqrt{5})/2$	$s = 1/2\{3(t+1) \pm \sqrt{5(t^2+6t+1)}\}$	$r = N/8(s+t+1) \} 1/2$ $p = s1/2r \quad q = t1/2r$	$8(st+s+t)r^4/N$
1				24		$y = \sqrt{8-x^2}$	$a = N/2(x+y+4) \} 1/2$ $c_1 = x1/2a \quad c_2 = y1/2a$	$8a^4/N$
		1	2	20	$0 \leq x \leq 2\sqrt{2}$	$y = \sqrt{1/8-x^2}$	$c = N/2(4x+4y+1) \} 1/2$ $a_1 = x1/2c \quad a_2 = y1/2c$	d^4/N
		2	1	22	$0 \leq x \leq \frac{1}{2\sqrt{2}}$	$y = \sqrt{2-x^2}$	$p = N/2(x+y+4) \} 1/2$ $c_1 = x1/2p \quad c_2 = y1/2p$	$4p^4/N$
	1 $p=q$		2	24	$0 \leq x \leq 1$	$y = \{(1-2x^2)/8\}^{1/2}$	$c = N/2(4x+4y+1) \} 1/2$ $p = x1/2c \quad a = y1/2c$	$4(x^2+2y^2)c^4/N$
	1 $p=q$	1	1	26	$0 \leq x \leq \frac{1}{2\sqrt{2}}$	$y = \frac{1}{2}\{3x \pm \sqrt{5x^2+16}\}$	$a = \{N/4(x+y+2)\}^{1/2}$ $p = x1/2a \quad q = y1/2a$	$4(2+xy)a^4/N$
	1		1	20	$x \geq 0$	$y = \frac{1}{2}\{3x \pm \sqrt{5x^2-2}\}$	$c = \{N/2(2x+2y+1)\}^{1/2}$ $p = x1/2c \quad q = y1/2c$	$4xyc^4/N$
	1		1	18	$x \geq 0.63$			

Tabla 1.3

S ₁ a	S ₂ c	S ₃ f	S ₄ p	S ₅ p	Número de (N) ptos. N-N ₀			Rango de los parámetros y valor de las coordenadas en función de las mismas para que el diseño sea rotatorio			Valor de λ_4/λ_2^2	
					k=4	k=5	k=6					
1	2				32	52	88	156	$0 \leq x \leq \sqrt{2^{k-1}} a$	$y = \sqrt{2^k a - x^2}$	$a = (N/2(x+y+a_2^{k-1}))^{1/2}$ $c_1 = x^{1/2} a$ $c_2 = y^{1/2} a$	$2^k a^4 / N a - 1$
2	1				40	74	140	270	$0 \leq x \leq \sqrt{2^{k-1}} a_1$	$y = \sqrt{(2^k - a_1 x^2) / a_2}$	$c = (N/2(1+2^{k-1}(a, x+a_2 y)))^{1/2}$ $a_1 = x^{1/2} c$ $a_2 = y^{1/2} c$	c^4 / N
2	2	1			48	100	216	476	$0 \leq x \leq \sqrt{(2k-5)2^{k-3}}$	$y = \sqrt{(2k-5)2^{k-2} - x^2}$	$t = (N/2(x+y+(k-1)2^{k-2}))^{1/2}$ $c_1 = x^{1/2} f$ $c_2 = y^{1/2} f$	$(k-2)2^{k-1} f^4 / N$
2			1		-	104	188	340	$0 \leq x \leq \sqrt{2^{1-k}(k-1)/a_2}$	$y = \{2^{1-k}(k-4) - 1x^2\}^{1/2} / a_2$	$p = (N/(4(k-1)+2^k(a_1 x+a_2 y)))^{1/2}$ $a_1 = x^{1/2} p$ $a_2 = y^{1/2} p$	$2(k-2)p^4 / N$
1	1		1		-	82	136	226	$0 \leq x \leq \sqrt{2^k}$	$y = \sqrt{2^k - x^2}^{1/2} / 2(k-4)$	$a = \{N/(2x+4(k-1)y+2^k a)\}^{1/2}$ $c = x^{1/2} a$ $p = y^{1/2} a$	$(4y+a^2)^k a^4 / N$
2				1	48	100	184	308	$0 \leq x \leq \sqrt{(k-2)(7-k)}$	$y = \sqrt{(k-2)(7-k) - x^2}$	$p = \{N/2(x+y+(k-1)(k-2))\}^{1/2}$ $c_1 = x^{1/2} p$ $c_2 = y^{1/2} p$	$8(k-2)p^4 / N$

(N) Se supone una replicación completa
en el conjunto S₁

Tabla 1.4

Simplex de primer orden, se puede considerar la matriz - de los diseños Simplex - Sum como la matriz ampliada:

$$\underline{D} = \begin{bmatrix} a_{1\underline{D}_1} \\ a_{2\underline{D}_2} \\ \dots \\ a_{s\underline{D}_s} \\ \dots \\ a_{k+1\underline{D}_{k+1}} \end{bmatrix} \quad (1.88)$$

Donde cada \underline{D}_s constituye una submatriz $\binom{k+1}{s} \times k$, cuyas filas consisten en las diferentes sumas posibles de las $k+1$ filas de \underline{D}_1 consideradas de s en s . Para valores de k superiores a cinco, resulta posible la construcción de diseños "Simplex - Sum" reducidos, con un menor número de puntos. La tabla 1.5 resume esquemáticamente estos diseños para distintos espacios k -dimensionales. El número de puntos centrales incluidos es el que proporciona una distribución uniforme de la varianza dentro del diseño (valores de λ_4 normalizados, según la tabla 1.1). Se incluye además con fines comparativos el número de puntos de las fracciones más reducidas correspondientes a los diseños de Box - Hunter de la tabla 1.2. Como se puede observar, para $k=2$ y $k=3$ resultan respectivamente el diseño hexagonal y el factorial compuesto examinados anteriormente. Especialmente interesante por su escaso número de puntos frente al número de coeficientes a estimar, es el diseño "Simplex - Sum" para $k=7$. Igual sucede, aunque no se incluye en la tabla en el de nueve dimensiones.

Otros tipos de diseños rotatorios de segundo orden han sido propuestos en la bibliografía. Así Herzberg (18), proporciona un método para la construcción de diseños rotatorios en k dimensiones, tomando co-

Coeficientes multiplicativos											No de puntos experimentales		
k	Tipo de diseño	a ₁	a ₂	a ₃	a ₄	a ₅	a ₆	a ₇	a ₈	Puntos rad.	Simplex- Sum	Puntos rad.	Puntos centr.
2	Standard	1	1							6	3	8	5
3	Standard	1	0,841							14	6	14	6
4	Standard	1	0,760	0,760	1					30	14	24	7
5	Standard	1	0,707	0,639	0,707	1				62	24		
	Reducido	1	0,841		0,841	1				42	10		
	Reducido	1		0,760		1				32	8	26	6
6	Standard	1	0,669	0,562	0,562	0,669	1			126	38		
	Reducido	1		0,595	0,595		1			84	16		
	Reducido	1	1			1	1			56	13	44	9
7	Standard	1	0,639	0,508	0,473	0,508	0,639	1		254	59		
	Reducido	1		0,577		0,577		1		128	21		
	Reducido	1			0,595			1		86	15		
	Reducido	0	1				1			56	10	78	14
8	Standard	1	0,615	0,467	0,411	0,411	0,467	0,615	1	510	90		
	Reducido	1			0,447	0,447			1	270	26		
	Reducido	0	1	0,577			0,577	1		240			
	Reducido	1		0,577			0,577		1	186	28	80	13

Tabla 1.5
Diseños Simplex-Sum

mo base uno en $k-1$ dimensiones. Sin embargo el número de puntos precisos es demasiado alto. Finalmente, Draper y Herzberg (19), derivan nuevos diseños rotatorios de segundo orden, considerando fracciones replicadas de distinto radio del diseño factorial, en combinación con la figura análoga al octaedro. Aunque el número de puntos experimentales es siempre superior a los análogos -- factoriales compuestos, pueden ser útiles en alguna ocasión, cuando sea precisa la replicación de algún bloque experimental.

1.2.10.3.1.- Coeficientes de la ecuación

En orden a la simplificación de la notación, es conveniente la utilización de las siguientes expresiones:

$$\{0y\} = \sum_{u=1}^N x_{0u} y_u \quad (1.89)$$

$$\{iy\} = \sum_{u=1}^N x_{iu} y_u \quad (1.90)$$

$$\{ijy\} = \sum_{u=1}^N x_{iu} x_{ju} y_u \quad (1.91)$$

Pudiéndose emplear entonces las siguientes ecuaciones para la estimación de los coeficientes del polinomio de segundo orden:

$$b_0 = AN^{-1} (2\lambda_4^2 (k+2) \{0y\} - 2\lambda_4 c \sum_{i=1}^k \{iiy\}) \quad (1.92)$$

$$b_i = cN^{-1} \{iy\} \quad (1.93)$$

$$b_{ii} = AcN^{-1}(c((k+2)\lambda_u - k)\{iiy\} + c(1-\lambda_u) \sum_{j=1}^k \{jjy\} - 2\lambda_u\{0y\}) \quad (1.94)$$

$$b_{ij} = c^2 N^{-1} \lambda_u^{-1} i j y \quad (1.95)$$

donde, como antes

$$A = (2\lambda_u(k+2)\lambda_u - k)^{-1} \quad (1.96)$$

y el factor de escala c:

$$c = N / \sum_{u=1}^N x_{iu}^2 \quad (1.97)$$

Las varianzas y covarianzas de los estimados se deducen directamente a partir de la matriz de precisión del diseño (ecuación 1.51), y son:

$$V(b_0) = 2A\lambda_u (k+2)\sigma^2 N^{-1} \quad (1.98)$$

$$V(b_i) = c\sigma^2 N^{-1} \quad (1.99)$$

$$V(b_{ii}) = A((k+1)\lambda_u - (k-1))c^2\sigma^2 N^{-1} \quad (1.100)$$

$$V(b_{ij}) = c^2\sigma^2 (N\lambda_u)^{-1} \quad (1.101)$$

Caso de que el diseño además de rotatorio sea ortogonal, las anteriores ecuaciones se simplifican

notablemente al ser λ_4 la unidad.

La ecuación obtenida puede ser sometida - si se desea, a un posterior análisis canónico para determinar el tipo de superficie de que se trata. (Apéndice 2) (8), (31), (34).

1.2.10.3.2.- Análisis de varianza

Como siempre la suma de cuadrados total - $S = y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_N^2$, con N grados de libertad, puede ser dividida en dos partes, la suma de cuadrados debida al ajuste de la ecuación de segundo orden, S_{02} con un número de grados de libertad igual a $(k+1)(k+1)/2$, y la suma residual de cuadrados R obtenida por diferencia entre las dos primeras, con $N - (k+1)(k+1)/2$ grados de libertad.

$$R = S - S_{02} \quad (1.102)$$

La suma de cuadrados debida a la regresión puede ser subdividida en tres partes:

i) La suma S_0 con un grado de libertad, asociada con el ajuste de un polinomio de orden cero, llamada corrección debida a la media:

$$S_0 = \{0y\}^2/N \quad (1.103)$$

ii) La suma $S_{1.0}$ con k grados de libertad, asociada con el ajuste de un polinomio de primer grado:

$$S_{1.0} = \sum_{i=1}^k b_i \{iy\} \quad (1.104)$$

iii) La suma $S_{2,1,0}$ con $k(k+1)/2$ grados de libertad, asociada con el ajuste de un polinomio de segundo orden:

$$S_{2,1,0} = b_0\{0y\} + \sum_{i=1}^k \sum_{j=i}^k b_{ij}\{ijy\} - \{0y\}^2/N \quad (1.105)$$

En ocasiones puede resultar conveniente - aislar la suma cuadrática de algún coeficiente o coeficientes en particular, para estudiar su significación. Esto puede realizarse de forma adecuada, obteniendo la - suma cuadrática debida a la regresión del modelo reducido, y substrayéndola del modelo completo.

Igualmente pueden efectuarse tests estadísticos para determinar la bondad del ajuste al modelo supuesto, si, para ello se dispone de una estimación del error experimental (31),(32),(33),(Apéndice 3).

1.2.10.4.- Diseños rotatorios de tercer orden

Los diseños de tercer orden, que han sido escasamente estudiados hasta el presente, vienen igualmente caracterizados por su matriz momento, directamente deducible de la ecuación 1.38. La forma de esta matriz - se expone en la ecuación 1.106, en donde $\underline{G}, \underline{K}_1, \lambda_4 \underline{I}$, y $\lambda_6 \underline{I}$ son las submatrices expresadas mediante las ecuaciones - 1.107, 1.108, 1.109, y 1.110.

La matriz de precisión, inversa de la anterior, se deduce a partir de las submatrices $\underline{G}, \underline{K}_1, \lambda_4 \underline{I}$ y $\lambda_6 \underline{I}$ e igualmente se expresará en función de estas mismas (ecuaciones 1.111, 1.112, 1.113, y 1.114)

$$N^{-1}(\bar{X}'X) = \begin{matrix} & \begin{matrix} 0 & 11 & 22 & \cdot & \cdot & \cdot & kk \end{matrix} \\ \begin{matrix} 0 \\ 11 \\ 22 \\ \cdot \\ \cdot \\ kk \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \\ 1 & 3\lambda_4 & \lambda_4 & \cdot & \cdot & \cdot & \lambda_4 \\ 1 & \lambda_4 & 3\lambda_4 & \cdot & \cdot & \cdot & \lambda_4 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & \lambda_4 & \lambda_4 & \cdot & \cdot & \cdot & 3\lambda_4 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Ecuación 1.107

$$N^{-1}(\underline{X}'\underline{X}) = \begin{matrix} & \begin{matrix} i & iii & i11 & i22 & \cdot & ikk \end{matrix} \\ \begin{matrix} i \\ iii \\ i11 \\ i22 \\ \cdot \\ \cdot \\ ikk \end{matrix} & \begin{bmatrix} 1 & 3\lambda_4 & \lambda_4 & \lambda_4 & \cdot & \lambda_4 \\ 3\lambda_4 & 15\lambda_6 & 3\lambda_6 & 3\lambda_6 & \cdot & 3\lambda_6 \\ \lambda_4 & 3\lambda_6 & 3\lambda_6 & \lambda_6 & \cdot & \lambda_6 \\ \lambda_4 & 3\lambda_6 & \lambda_6 & 3\lambda_6 & \cdot & \lambda_6 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \lambda_4 & 3\lambda_6 & \lambda_6 & \lambda_6 & \cdot & 3\lambda_6 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$\lambda_4 \underline{\underline{I}} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 12 & 13 & . & . & . & k-1,k \end{matrix} \\ \begin{matrix} 12 \\ 13 \\ . \\ . \\ . \\ k-1,k \end{matrix} & \left[\begin{array}{cccccc} \lambda_4 & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & \lambda_4 & . & . & . & 0 \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & . & . & . & \lambda_4 \end{array} \right] \end{matrix}$$

Ecuación 1.109

$$\lambda_6 \underline{\underline{I}} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 123 & 124 & . & . & . & k-1,k-2,k \end{matrix} \\ \begin{matrix} 123 \\ 124 \\ . \\ . \\ . \\ k-1,k-2,k \end{matrix} & \left[\begin{array}{cccccc} \lambda_6 & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & \lambda_6 & . & . & . & 0 \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & . & . & . & \lambda_6 \end{array} \right] \end{matrix}$$

Ecuación 1.110

$$\underline{G}^{-1} = A \begin{bmatrix} b & c & c & . & . & . & c \\ c & d & e & . & . & . & e \\ c & e & d & . & . & . & e \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ c & e & e & . & . & . & d \end{bmatrix}$$

Ecuación 1.111

$$\underline{K}_i^{-1} = B \begin{bmatrix} f & g & g & . & . & . & g \\ g & h & m & . & . & . & m \\ g & m & w & . & . & . & m \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . \\ g & m & m & . & . & . & w \end{bmatrix}$$

Ecuación 1.112

$$\lambda_4^{-1} \underline{I} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 12 & 13 & . & . & . & k-1,k \end{matrix} \\ \begin{matrix} 12 \\ 13 \\ . \\ . \\ . \\ k-1,k \end{matrix} & \left[\begin{array}{cccccc} \lambda_4^{-1} & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & \lambda_4^{-1} & . & . & . & 0 \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & . & . & . & \lambda_4^{-1} \end{array} \right] \end{matrix}$$

Ecuación 1.113

$$\lambda_6^{-1} \underline{I} = \begin{matrix} & \begin{matrix} 123 & 124 & . & . & . & k-1,k-2,k \end{matrix} \\ \begin{matrix} 123 \\ 124 \\ . \\ . \\ . \\ k-1, \\ k-2,k \end{matrix} & \left[\begin{array}{cccccc} \lambda_6^{-1} & 0 & . & . & . & 0 \\ 0 & \lambda_6^{-1} & . & . & . & 0 \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . \\ 0 & 0 & . & . & . & \lambda_6^{-1} \end{array} \right] \end{matrix}$$

Ecuación 1.114

En las referidas ecuaciones, es:

$$b = 2(k+2)\lambda_4 \quad (1.115)$$

$$c = -2\lambda_4 \quad (1.116)$$

$$d = (k+1)\lambda_4 - k + 1 \quad (1.117)$$

$$e = 1 - \lambda_4 \quad (1.118)$$

$$f = 6(k+4)\lambda_6 \quad (1.119)$$

$$g = -6\lambda_4 \quad (1.120)$$

$$h = k+1 - (k-1)\lambda_4/\lambda_6 \quad (1.121)$$

$$m = 3(\lambda_4^2/\lambda_6 - 1) \quad (1.122)$$

$$w = 3(k+3 - (k+1)\lambda_4^2/\lambda_6) \quad (1.123)$$

y A y B vienen dados por

$$A = \{2\lambda_4((k+2)\lambda_4 - k)\}^{-1} \quad (1.124)$$

$$B = \{6((k+4)\lambda_6 - (k+2)\lambda_4)\}^{-1} \quad (1.125)$$

Como puede observarse, la ecuación 1.124 es análoga al 1.57, lo cual no es sorprendente puesto -- que ambas matrices de precisión, la de segundo orden (ecuación 1.51) y la de tercer orden (ecuaciones 1.111, -- 1.112, 1.113, y 1.114) se derivan de la expresión general para los momentos de un diseño rotatorio (ecuación 1.38).

A partir de las ecuaciones 1.134 - o 1.57 - y 1.125 se observa que valores de λ_4 y λ_6

$$\lambda_4 = k/(k+2) \quad (1.126)$$

$$\lambda_6 = 2(k+2)\lambda_4/(k+4) \quad (1.127)$$

imposibilitan la estimación de los coeficientes lineales cuadráticos y cúbicos, al ser la varianza de los mismos infinita. En la selección del diseño deberán, pues, evitarse estos valores denominados singulares.

En espacios bidimensionales los diseños -- más simples, y por tanto más interesantes, están constituidos por dos o más anillos concéntricos, cada uno de ellos con un número de puntos superior a seis. Se les -- puede adicionar además cualquier número de puntos centrales. Así, si se considera un conjunto de N puntos experimentales, distribuidos en dos anillos concéntricos --- - n_1 puntos en el primero de radio ρ_1 , y n_2 en el segundo de radio ρ_2 - más una serie de n_0 puntos en el centro del diseño, se pueden deducir expresiones para ρ_4 y ρ_6 , de manera semejante a la deducción de la ecuación 1.84:

$$\lambda_4 = \frac{N(n_1\rho_1^4 + n_2\rho_2^4)}{2(n_1\rho_1^2 + n_2\rho_2^2)^2} \quad (1.128)$$

$$\lambda_6 = \frac{N^2(n_1\rho_1^6 + n_2\rho_2^6)}{6(n_1\rho_1^2 + n_2\rho_2^2)^3} \quad (1.129)$$

En espacios tridimensionales el número de puntos necesarios para la construcción de un diseño rotata

torio de tercer orden resulta ya elevado pues oscila alrededor de cincuenta. Los diseños más simples están formados por distintas combinaciones de octaedros y hexaedros con radios diferentes. Para espacios de dimensión superior los diseños rotatorios de tercer orden sólo tienen interés teórico, puesto que, desde un punto de vista práctico, el número de experimentos necesarios resulta prohibitivo.

1.2.10.4.1.- Coeficientes de la ecuación

Los coeficientes de la ecuación de tercer orden pueden obtenerse a partir de la ecuación general para la estimación de coeficientes por mínimos cuadrados (ecuación 1.10), teniendo en cuenta las simplificaciones introducidas en la matriz de precisión al ser rotatorio el diseño (ecuaciones 1.111, 1.112, 1.113, y 1.114) (23).

1.2.10.4.2.- Análisis de varianza

N.R. Draper (23), describe el análisis de varianza para un modelo de tercer orden en tres dimensiones. Las sumas cuadráticas son análogas a las descritas en el apartado 1.2.10.3.2, aunque en el caso de modelos de tercer orden las sumas cuadráticas debidas a los términos de primer y tercer orden no se pueden separar al no ser ortogonales entre si, y por tanto deben ser consideradas conjuntamente. Obtenidas las sumas cuadráticas de los coeficientes, el procedimiento es completamente análogo al descrito en los anteriores apartados 1.2.10.3.2 y 1.2.10.2.2.

2.- OBJETO DE LA PRESENTE INVESTIGACION

Dados los siguientes supuestos:

1.- Importancia de los diseños experimentales y en especial de los rotatorios para el estudio de la influencia de las variables que intervienen en cualquier proceso o investigación química.

2.- Necesidad de disponer de estimados de los coeficientes de la ecuación representativa del fenómeno suficientemente precisos (varianza y sesgo mínimos) para su utilización en una posible optimización del proceso según el método de ascenso por el camino de mayor pendiente desarrollado por Box y Wilson.

3.- Importancia económica derivada del ahorro de tiempo y esfuerzo empleados en cualquier estudio y del aprovechamiento máximo posible de la experimentación efectuada.

4.- Posibilidad de que existan otros diseños distintos de los clásicos factorial y factorial compuesto, aplicables a la investigación química o de procesos químicos y que pudieran ser más convenientes económicamente, manteniendo sus cualidades matemático-estadísticas.

5.- Escasa importancia prestada en los trabajos publicados hasta el presente, a las limitaciones prácticas de los diseños propuestos, y que en algunos casos los convierte en inefectivos dada su alta incidencia económica.

6.- Importancia práctica de los diseños de segundo y tercer orden en espacios bidimensionales dado el relativamente escaso número de puntos experimentales precisos para su construcción, su facilidad de interpretación, y posibilidades de representación gráfica.

7.- Escaso conocimiento de los diseños rotatorios de tercer orden, tanto de sus propiedades como del tratamiento matemático, y dado que puede suponerseles una considerable importancia en el estudio de la influencia de las variables en espacios bidimensionales, cuando, como es frecuente, no puede ser reducido el campo experimental y la función del proceso no puede quedar limitada a un desarrollo en serie de orden dos por su complejidad,

se emprendió la presente investigación para cubrir los siguientes objetivos:

1.- Recopilar y estudiar en profundidad los diseños propuestos en la bibliografía, con el fin de sentar las bases para un posible desarrollo de diseños de mayor interés práctico.

2.- Proponer nuevos diseños, o bien desarrollar tratamientos secuenciales de los ya existentes, que permitan el aprovechamiento máximo de la experimentación efectuada, por lo que puedan ser de mayor interés práctico.

3.- Teniendo en cuenta la importancia de la precisión de los coeficientes estimados, estudiar ampliamente los nuevos diseños, con el fin de que su interés práctico, no pueda quedar desvirtuado por una falta de calidad matemática.

4.- Realizar el estudio teórico de los diseños rotatorios de tercer orden completando el limitado conocimiento existente, así como efectuar la experimentación precisa para probar su efectividad.

5.- Desarrollar un tratamiento secuencial entre los diseños de primer segundo y tercer orden en espacios bidimensionales, teniendo presentes los resultados del estudio teórico anteriormente realizado.

6.- Comparar experimentalmente mediante simulación por ordenador, la eficacia de los distintos diseños experimentales existentes, así como la de los nuevos diseños propuestos, al objeto de obtener conclusiones sobre la importancia e interés de todos ellos.

7.- Comparar prácticamente me--

diante la realización de experimentos en el laboratorio, la eficacia de los diseños experimentales existentes, -- así como la de los nuevos propuestos, para poder confirmar las conclusiones obtenidas en el punto 6.

3.- ESTUDIO DE LAS SUPERFICIES
DE RESPUESTA EN ESPACIOS
K - DIMENSIONALES

En los siguientes apartados se exponen las técnicas propuestas para el estudio de las superficies de respuesta de

- i) primer orden (apartado 3.1)
- ii) segundo orden (apartado 3.2)
- iii) tercer orden (apartado 3.3)

3.1.- SUPERFICIES DE PRIMER ORDEN

El ajuste de una superficie de orden uno reviste especial importancia cuando se trata de aplicar el método de ascenso por el camino de máxima pendiente - propuesto por Box y Wilson. Aunque si bien es posible - seguir éste en una superficie de segundo orden, los cálculos necesarios para obtener la línea de ascenso son -- ciertamente complicados. Por otro lado, si se reduce la ecuación de segundo orden a variables canónicas (apéndice 2), y se asciende por el eje de la cónica correspondiente, no se obtiene mayor simplificación operativa, ya que de nuevo los cálculos son realmente laboriosos. Es por consiguiente de sumo interés, el ajuste de una ecuación de primer orden, ya que en este caso la obtención - de la línea de ascenso, se puede decir que es inmediata.

Por otra parte, la ecuación ajustada debe ser significativa a cierto nivel de probabilidad. Es posible además que, si la información que se posee acerca de la superficie de respuesta es escasa - caso usual --- cuando se realiza este tipo de investigación - la ecuación obtenida no sea válida estadísticamente. La solu--ción que se ofrece en la bibliografía es la casi repetición completa de la experimentación efectuada, contrayendo la amplitud de la subregión en estudio. Evidentemente el coste que representa tal solución puede ser, en ocasiones, causa de descartar el inicio de una investigación de esta índole.

Sentadas pues estas bases, el trabajo realizado ha tenido como objetivo remediar en lo que fuese posible tal anomalía, creando, o bien un nuevo diseño -- que se autocontrayera en cuanto se presentase la circunstancia mencionada, o bien aprovechando los ya existentes

encontrar una combinación de los mismos que cumpliera el objetivo propuesto. Aunque la utilización de los diseños factoriales para el ajuste de ecuaciones de primer orden es, de hecho, casi unánime, existen numerosísimos diseños de primer orden en la bibliografía - recuérdese en este punto que todos los diseños rotatorios de segundo orden lo son asimismo de primero - por lo que la creación de un nuevo diseño rotatorio de primer orden con un número razonable de puntos, y con las ventajas deseadas, se ha descartado, al juzgarse como realmente imposible, orientándose la investigación hacia la búsqueda de combinaciones secuenciales de diseños de primer orden ya existentes.

3.1.1.- DIFERENTES COMBINACIONES POSIBLES PARA LA FORMACION DE DISEÑOS ROTATORIOS SECUENCIALES EN LOS DISTINTOS ESPACIOS K - DIMENSIONALES

En el presente trabajo se han desarrollado tres métodos de aplicación secuencial para la estimación de ecuaciones de primer orden.

Como base para efectuar las comparaciones se ha elegido el clásico diseño 2^5 factorial fraccionado $1/2$, que presenta un total de dieciséis puntos experimentales. La referencia al espacio de cinco dimensiones, es debida a ser el correspondiente al utilizado en la parte experimental de este estudio, aunque como se verá, este hecho resulta en realidad indiferente para la obtención de las conclusiones a que se llega.

La matriz de diseño del diseño 2^5 facto--

rial fraccionado $1/2$ con dos puntos centrales, según coordenadas estandarizadas (ecuaciones 1.4 y 1.5), se expone en la tabla 3.1. A partir de ella, resulta fácil derivar la matriz X de las variables independientes, y a partir de ésta, la matriz de sesgo A (ecuación 1.15) expuesta en la tabla 3.2 y que ha de servir para la posterior comparación - según lo expuesto en el apartado 1.2.4 - de los diseños que se proponen. La matriz de precisión no se incluye en la discusión debido a que todos los diseños que se proponen son rotatorios y consecuentemente la matriz de precisión para todos ellos es la matriz identidad (apartado 1.2.10.2).

En los apartados que siguen se estudian separadamente las tres combinaciones secuenciales que se proponen.

3.1.1.1.- Combinación de diseños Simplex

Las combinaciones de diseños Simplex de distinto radio constituyen diseños ortogonales y por lo tanto rotatorios, de primer orden.

Las combinaciones que aquí se proponen están formadas por dos diseños Simplex, con una razón de radios entre ambos igual a r . Es posible deducir una expresión general para tales diseños en el espacio k - dimensional. La matriz de diseño que se obtiene se expone en la página siguiente y constituye la ecuación 3.1. Las constantes que figuran en la referida ecuación son las siguientes:

$$a_1 = \frac{\sqrt{2(k+1)}}{2(k+1)} \quad (3.2)$$

$$\underline{D}_S =$$

$$\begin{bmatrix} -a_1 & -a_1 & -a_1 & \cdot & \cdot & -a_1 \\ b_1 & c_1 & c_1 & \cdot & \cdot & c_1 \\ c_1 & b_1 & c_1 & \cdot & \cdot & c_1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ c_1 & c_1 & c_1 & \cdot & \cdot & b_1 \\ a_2 & a_2 & a_2 & \cdot & \cdot & a_2 \\ b_2 & c_2 & c_2 & \cdot & \cdot & c_2 \\ c_2 & b_2 & c_2 & \cdot & \cdot & c_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ c_2 & c_2 & c_2 & \cdot & \cdot & b_2 \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 \end{bmatrix}$$

Ecuación 3.1

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
1,061	1,061	1,061	1,061	1,061
1,061	1,061	1,061	-1,061	-1,061
1,061	1,061	-1,061	1,061	-1,061
1,061	1,061	-1,061	-1,061	1,061
1,061	-1,061	1,061	1,061	-1,061
1,061	-1,061	1,061	-1,061	1,061
1,061	-1,061	-1,061	1,061	1,061
1,061	-1,061	-1,061	-1,061	-1,061
-1,061	1,061	1,061	1,061	-1,061
-1,061	1,061	1,061	-1,061	1,061
-1,061	1,061	-1,061	1,061	1,061
-1,061	1,061	-1,061	-1,061	-1,061
-1,061	-1,061	1,061	1,061	1,061
-1,061	-1,061	1,061	-1,061	-1,061
-1,061	-1,061	-1,061	1,061	-1,061
-1,061	-1,061	-1,061	-1,061	1,061
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Tabla 3.1

Diseño 2^5 factorial fraccionado $1/2$. Matriz de diseño.

	B11	B22	B33	B44	B55	B12	B13	B14	B15	B23	B24	B25	B34	B35	B45
B0	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B3	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B4	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Tabla 3.2

Diseño 2^5 factorial fraccionado, Matriz de sesgo.

$$b_1 = \frac{a_1(\sqrt{k+1} + k^2 - 1)}{k \ k+1} \quad (3.3)$$

$$c_1 = \frac{a_1(\sqrt{k+1} - k - 1)}{k \ k+1} \quad (3.4)$$

$$a_2 = a_1 r \quad (3.5)$$

$$b_2 = \frac{a_1((k-1)\sqrt{k+1} - 1)}{k} r \quad (3.6)$$

$$c_2 = - \frac{a_1(1 + \sqrt{k+1})r}{k} \quad (3.7)$$

siendo r la razón de radios de los dos diseños Simplex. Obsérvese que en la matriz de diseño, el subíndice de -- las coordenadas se corresponde con el Simplex a que pertenecen. El Simplex 2 es pues el de menor radio ya que $0 \leq r \leq 1$.

La matriz expresada en la ecuación 3.1 se refiere a dos diseños Simplex centrados en el origen de coordenadas, y con la arista del mayor igual a la unidad. Para su manejo, sin embargo, esta no es la expresión más conveniente, por lo que se hace necesario estandarizarla de acuerdo con la ecuación 1.5. El factor de escala para la matriz de diseño propuesta resulta ser:

$$c = \frac{2N}{1+r^2} \quad (3.8)$$

siendo independiente de la dimensión del espacio considerado. De acuerdo con el factor de escala se estandariza el diseño multiplicando todos los elementos de la matriz \underline{D}_s por el factor:

$$f = c^{1/2} \quad (3.9)$$

La figura 3.1 muestra un diseño Simplex - combinado en el espacio bidimensional, con una razón de radios $r = 0,5$.

La razón de radios r está relacionada directamente con el sesgo de los coeficientes estimados y, como se verá, con la reducción del intervalo experimental en la aplicación secuencial de los diseños. La razón de radios que se ha elegido para este estudio ha sido de 0,5, aunque a continuación se estudia la relación existente entre el sesgo de los estimados y r .

El sesgo de los coeficientes de primer orden viene dado por la ecuación:

$$\epsilon(b_i) = \beta_i + \sum_{g=1}^k \sum_{h=1}^k |ghi| \beta_{gh} \quad (3.10)$$

Observando la matriz de diseño expresada en la ecuación 3.1, se puede comprobar que solo existen tres tipos de momentos de tercer orden para este tipo de diseño: m_1 de la forma $|iii|$, m_2 de la forma $|hhi|$ y m_3 de la forma $|ghi|$ ($i \neq h, h \neq g, i \neq g$). A partir de la matriz de momento normalizada es posible deducir la siguiente expresión para m_i ($i=1,2,3$):

$$m_i = A_i(k)N^{1/2} \frac{(1+r^3)}{(1+r^2)^{3/2}} + B_i(k)N^{1/2} \frac{(1-r^3)}{(1+r^2)^{3/2}} \quad (3.11)$$

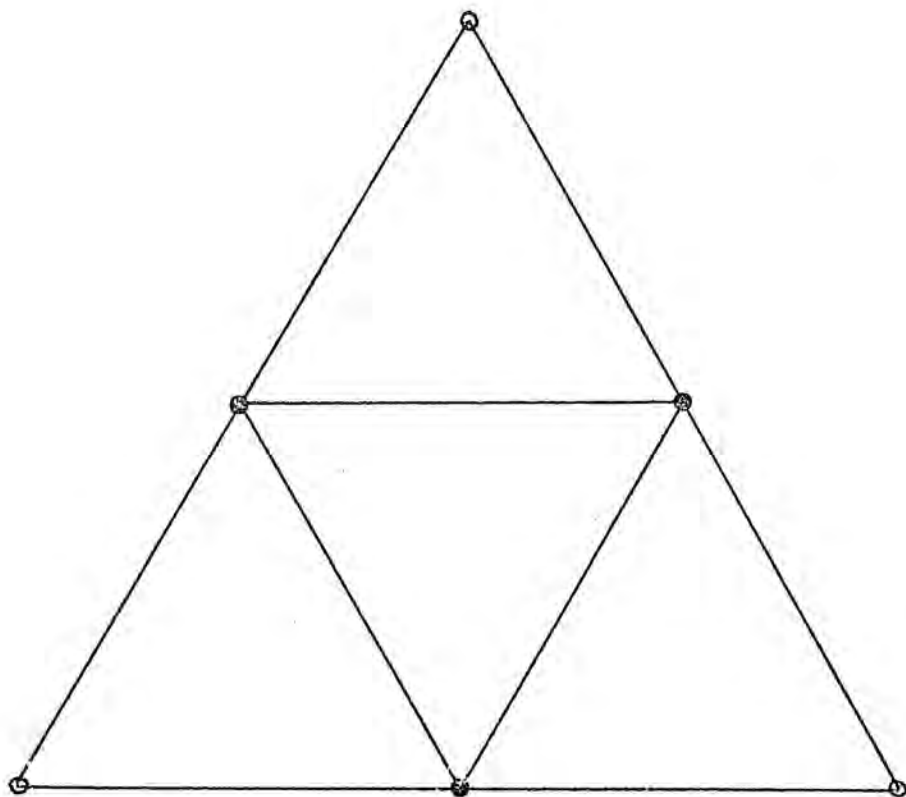


Figura 3.1

*Diseño Simplex combinado en el
espacio bidimensional ($r=0,5$).*

en donde:

$$A_1(k) = \frac{(k-1)(k-2)}{k^2} \quad (3.12)$$

$$B_1(k) = \frac{2(k-1)(k+1)^{1/2}}{k^2(k+1)} \quad (3.13)$$

$$A_2(k) = - \frac{(k-2)}{k^2} \quad (3.14)$$

$$B_2(k) = - \frac{2(k+1)^{1/2}}{k^2(k+1)} \quad (3.15)$$

$$A_3(k) = \frac{2}{k^2} \quad (3.16)$$

$$B_3(k) = - \frac{(k+2)(k+1)^{1/2}}{k^2(k+1)} \quad (3.17)$$

Elegida la razón de radios r , el uso adecuado de las ecuaciones anteriores, proporcionará la medida en que el sesgo afecta a los coeficientes de primer orden estimados. Derivando las funciones m_i con respecto a r se puede observar que m_1 disminuirá con el aumento de r , al contrario de m_2 y m_3 , los cuales aumentarán paralelamente con la razón de radios. Asimismo cabe mencionar que el sesgo aumenta proporcionalmente a la raíz cuadrada del número total de puntos experimentales N .

La tabla 3.3 muestra las coordenadas es--

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
1,366	1,366	1,366	1,366	1,366
2,950	0,396	0,396	0,396	0,396
0,396	2,950	0,396	0,396	0,396
0,396	0,396	2,950	0,396	0,396
0,396	0,396	0,396	2,950	0,396
0,396	0,396	0,396	0,396	2,950
0,683	0,683	0,683	0,683	0,683
1,202	0,471	0,471	0,471	0,471
0,471	1,202	0,471	0,471	0,471
0,471	0,471	1,202	0,471	0,471
0,471	0,471	0,471	1,202	0,471
0,471	0,471	0,471	0,471	1,202
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Tabla 3.3

Diseño Simplex combinado. Matriz de diseño

tandarizadas para un diseño Simplex combinado con dos -- puntos centrales en el espacio de cinco dimensiones, correspondiente al de la experimentación efectuada. Esta serie de coordenadas constituyen evidentemente la matriz de diseño en cinco dimensiones para el diseño propuesto, y a partir de ella es posible la construcción de la matriz \underline{X} de las variables independientes. La matriz de -- sesgo \underline{A} , cuyos elementos muestran el posible sesgo de -- los coeficientes estimados por los supuestamente nulos -- de segundo orden, se muestra en la tabla 3.4. Idénticos resultados se obtienen utilizando las ecuaciones 3.10 y 3.11 para $k=5$ y $r=0,5$. Resulta fácil en este punto comprobar que la matriz de precisión es precisamente la matriz identidad $(N(\underline{X}'\underline{X})^{-1} = \underline{I})$.

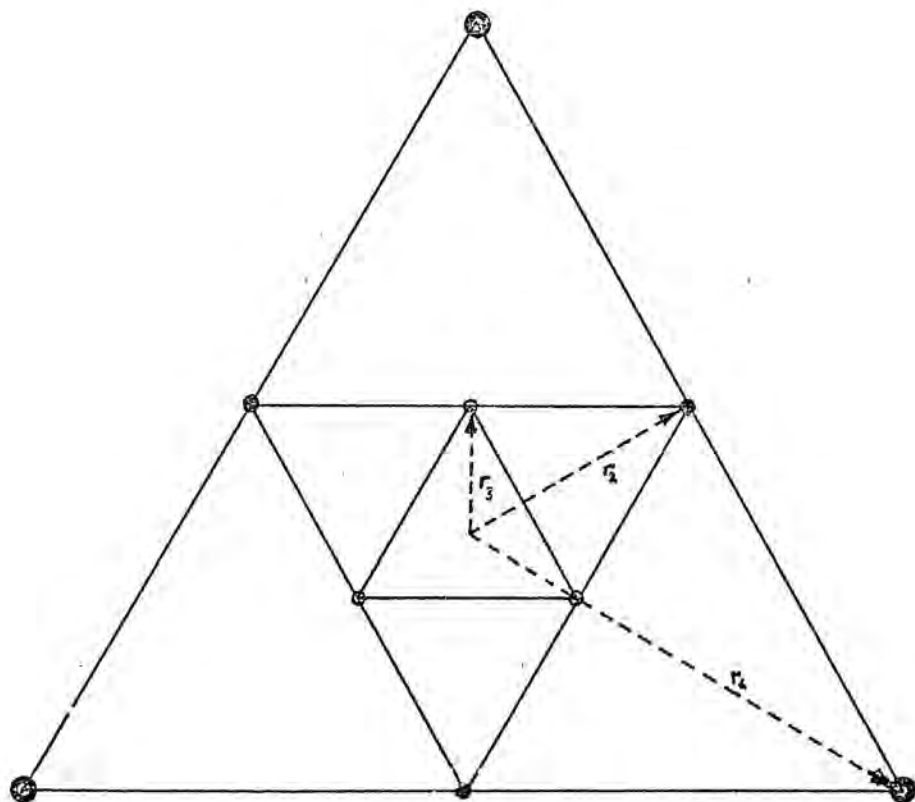
Como puede observarse este tipo de diseño es secuencial, puesto que si la ecuación ajustada resulta no significativa, basta la repetición de $k+1$ puntos -- (los del diseño Simplex de mayor radio), situándolos a -- un radio 0,25 veces el mayor de los dos del diseño primitivo. Así se obtiene un nuevo diseño formado por dos -- bloques de $k+1$ puntos cada uno de ellos, más un determinado número de puntos centrales. El bloque de mayor radio contiene los puntos ya realizados, y el de radio menor lo constituyen la serie de $k+1$ puntos repetidos. La figura 3.2 muestra esquemáticamente la aplicación de la secuencia para un espacio bidimensional. En todos los -- casos la reducción del intervalo experimental es del 50% del valor primitivo.

3.1.1.2.- Combinación de diseños factoriales fraccionados

La combinación de diseños factoriales fraccionados de distinto radio, constituye asimismo diseños --

	B11	B22	B33	B44	B55	B12	B13	B14	B15	B23	B24	B25	B34	B35	B45
B0	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B1	1,75	-0,44	-0,44	-0,44	-0,44	-0,44	-0,44	-0,44	-0,44	-0,03	-0,03	-0,03	-0,03	-0,03	-0,03
B2	-0,44	1,75	-0,44	-0,44	-0,44	-0,44	-0,03	-0,03	-0,03	-0,03	-0,03	-0,03	-0,03	-0,03	-0,03
B3	-0,44	-0,44	1,75	-0,44	-0,44	-0,03	-0,44	-0,03	-0,03	-0,44	-0,03	-0,03	-0,44	-0,44	-0,03
B4	-0,44	-0,44	-0,44	1,75	-0,44	-0,03	-0,03	-0,44	-0,03	-0,03	-0,44	-0,03	-0,44	-0,03	-0,44
B5	-0,44	-0,44	-0,44	-0,44	1,75	-0,03	-0,03	-0,03	-0,44	-0,03	-0,03	-0,44	-0,03	-0,44	-0,44

Tabla 3.4
 Diseño Simplex combi-
 nado. Matriz de sesgo



- Puntos correspondientes al 1^{er} diseño Simplex combinado
- Puntos comunes al 1^{er} y 2^o diseños Simplex combinado
- Puntos adicionales correspondientes al 2^o diseño Simplex combinado

Figura 3.2

Diseño Simplex combinado. Secuencia de aplicación

ortogonales y consecuentemente rotatorios de primer orden de aplicación secuencial.

Las combinaciones que aquí se proponen están formadas por dos fracciones de distinto radio del diseño factorial, o bien de una fracción adecuada del mismo. Dichas fracciones son complementarias una de la otra, en el sentido de que si la razón de radios fuese la unidad, es decir, si ambos fraccionados tuviesen el mismo radio, entonces el diseño formado sería el factorial completo o bien la fracción adecuada que se hubiese considerado. La razón de radios que aquí se ha estudiado ha sido de 0,5. Naturalmente son posibles otros valores así como combinaciones formadas por más de dos hiperesferas de puntos equiespaciados.

El tipo de fraccionado que se puede emplear para la construcción de tales diseños depende del número de dimensiones del espacio considerado. Se debe tener presente, no obstante, que a medida que aumenta el grado de fraccionamiento, aumenta paralelamente el sesgo derivado de posibles efectos de segundo orden. Así para $k=3$ y 4 resultan convenientes factoriales fraccionados $1/2$. Para $k=5$ es adecuado el fraccionado $1/4$ y para espacios de dimensión más elevada, pueden emplearse fraccionados superiores. Para $k=2$ no existe ninguna fracción adecuada del diseño factorial, y por lo tanto, no es posible la construcción de los diseños que aquí se proponen.

Dada esta diversidad, el estudio de la dependencia del sesgo de los coeficientes con la razón de radios r , se ha realizado particularmente para el diseño que posteriormente se estudia, es decir, para el diseño 2^5 factorial fraccionado $1/4$ combinado. No obstante el procedimiento es general para cualquier espacio k - di-

mensional, teniendo en cuenta que siempre podrán construirse p diseños fraccionados $1/p$.

La matriz para tal diseño se expone en la página siguiente (ecuación 3.18). El factor f por el -- que se deben multiplicar los elementos de la matriz \underline{D}_f -- para estandarizar el diseño, resulta ser:

$$f = N^{1/2} / \{8(1+r^2)\}^{1/2} \quad (3.19)$$

El sesgo de los coeficientes se calcula análogamente mediante la ecuación 3.10, pero en este caso, sólo existe un tipo de momento de tercer orden m distinto de cero. -- Su valor se puede calcular a partir de la matriz normalizada:

$$m = \frac{N^{1/2}(1-r^3)}{\{2(1+r^2)\}^{3/2}} \quad (3.20)$$

Se observa que para $r=0$ el sesgo es idéntico al del diseño factorial fraccionado $1/4$, y para $r=1$, el sesgo es nulo, como corresponde al diseño factorial fraccionado $1/2$. Asimismo cabe mencionar que el sesgo de los coeficientes aumenta a medida que r disminuye, hecho que resulta claro, dada la función expresada en la ecuación 3.20.

La tabla 3.5 muestra la matriz de diseño para la combinación de dos fraccionados $1/4$ del diseño 2^5 factorial, según las coordenadas estandarizadas (ecuaciones 1.4 y 1.5). La razón de radios es como ya se ha mencionado 0,5. A partir de esta matriz resulta relativamente sencillo derivar una expresión para la matriz de sesgo \underline{A} (tabla 3.6), característica del diseño.

$$\underline{D}_f =$$

(Ecuación 3.18)

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ r & r & r & r & -r \\ r & r & -r & -r & -r \\ r & -r & r & -r & r \\ r & -r & -r & r & r \\ -r & r & r & -r & r \\ -r & r & -r & r & r \\ -r & -r & r & r & -r \\ -r & -r & -r & -r & -r \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
1,342	1,342	1,342	1,342	1,342
1,342	1,342	-1,342	-1,342	1,342
1,342	-1,342	1,342	-1,342	-1,342
1,342	-1,342	-1,342	1,342	-1,342
-1,342	1,342	1,342	-1,342	-1,342
-1,342	1,342	-1,342	1,342	-1,342
-1,342	-1,342	1,342	1,342	1,342
-1,342	-1,342	-1,342	-1,342	1,342
0,671	0,671	0,671	0,671	-0,671
0,671	0,671	-0,671	-0,671	-0,671
0,671	-0,671	0,671	-0,671	0,671
0,671	-0,671	-0,671	0,671	0,671
-0,671	0,671	0,671	-0,671	0,671
-0,671	0,671	-0,671	0,671	0,671
-0,671	-0,671	0,671	0,671	-0,671
-0,671	-0,671	-0,671	-0,671	-0,671
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Tabla 3.5

Diseño fraccionado combinado. Matriz de diseño

	B11	B22	B33	B44	B55	B12	B13	B14	B15	B23	B24	B25	B34	B35	B45
B0	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,94	0,00	0,00	0,00
B2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,94	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B3	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,94
B4	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,94	0,00
B5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,94	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,94	0,00	0,00

Tabla 3.6

Diseño fraccionado combinado. Matriz de sesgo.

Como puede observarse, el diseño resulta igualmente secuencial, puesto que si la ecuación ajustada es no significativa, basta la repetición del fraccionado correspondiente a la hiperesfera de mayor radio, si tuándolo en un hiperesfera de radio 0,5 veces el radio - de la mayor de las dos hiperesferas que formaban el diseño primitivo.

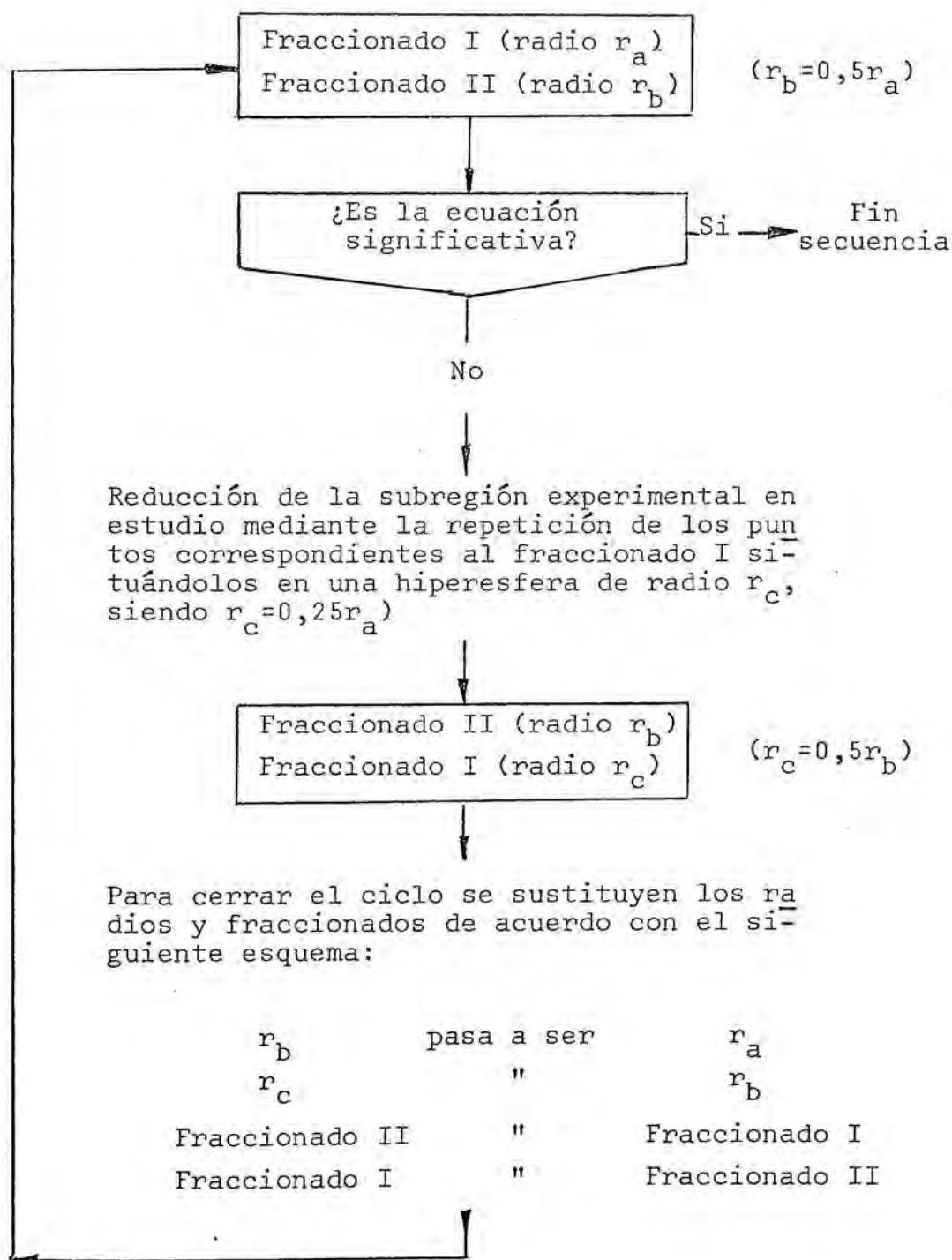
El esquema mostrado en la página siguiente aclara la aplicación secuencial de los diseños aquí - presentados. Asimilando los bloques de los diseños Simplex combinados a los fraccionados del factorial, el mismo esquema sirve para mostrar el funcionamiento de los - diseños secuenciales mencionados en el apartado anterior, puesto que, esencialmente, es la misma idea.

Conviene advertir que el diseño factorial fraccionado $1/4$, es decir, cualquiera de los dos bloques que constituyen el diseño propuesto, son asimismo diseños rotatorios de primer orden - como lo son los diseños Simplex tratados en el apartado anterior - aunque sus -- propiedades - sesgo de los estimados y precisión de los mismos - son inferiores a las de los diseños propuestos.

3.1.1.3.- Diseños axiales

Se ha adoptado la denominación de diseños axiales para aquellos cuya matriz de diseño tiene la forma de la matriz expresada en la ecuación 3.21. De esta manera, en dos dimensiones, el diseño axial corresponde a un cuadrado con sus vértices situados en los ejes coordenados. En tres dimensiones los diseños axiales constituyen octaedros, mientras que en espacios k - dimensionales, forman figuras análogas al octaedro (hiperoctaedros)

APLICACION SECUENCIAL DE LOS DISEÑOS FACTORIALES
FRACCIONADOS COMBINADOS



Esquema 3.1

$$\underline{D}_a =$$

a	0	0	.	.	0
-a	0	0	.	.	0
0	a	0	.	.	0
0	-a	0	.	.	0
0	0	a	.	.	0
0	0	-a	.	.	0
.
.
0	0	0	.	.	a
0	0	0	.	.	-a
0	0	0	.	.	0
.
.
0	0	0	.	.	0

Ecuación 3.21

Los diseños axiales mencionados en la apartado 1.2.10.3, aunque bajo una denominación distinta, presentan unas características tales, que los convierten en excelentes diseños secuenciales de primer orden, aunque este hecho haya pasado desapercibido hasta el presente. En efecto, dada la especial ortogonalidad de las columnas de la matriz de diseño, es posible la reducción selectiva de una variable determinada, sin modificar el de las demás. Esto equivale a decir que con la sola repetición de dos puntos experimentales, una ecuación estadísticamente no significativa, puede pasar a serlo.

En líneas generales, el procedimiento a seguir en su aplicación secuencial, se podría esquematizar en los siguientes puntos:

i) Obtención de una ecuación de primer orden mediante un diseño axial.

ii) Estudio de la ecuación y de la significación de cada uno de sus coeficientes.

iii) Si el desajuste de la ecuación resulta significativo, se procede a la reducción selectiva de la variable (o en su caso variables) que más contribuya al mismo.

iv) Se realiza un nuevo diseño axial con las ecuaciones de cambio de variable (real a variable de diseño) modificadas de acuerdo con lo efectuado en iii)

v) Vuelta a ii)

No obstante los puntos de procedimiento expuestos, existen numerosas posibilidades de actuación. Así si una variable o un grupo de variables resultan no significativas, pueden permanecer en sus niveles iniciales, a lo largo de posibles y sucesivas reducciones de los niveles de las demás, o bien, si se cree conveniente, pueden asimismo modificarse selectivamente, en el sentido de incrementar el intervalo experimental al que van ligadas. Las combinaciones a que pueden dar lugar los diseños axiales, son múltiples y muy distintas, siendo su principal característica la gran flexibilidad derivada de la especial ortogonalidad de las variables entre sí, es decir, al no depender en un experimento, el nivel de una variable del de las demás.

Por otra parte las propiedades estadísticas de un diseño axial son totalmente comparables e incluso con ventaja - como se indica en el próximo apartado - a las de cualquier otro diseño de primer orden. La tabla 3.7 muestra la matriz de diseño en coordenadas normalizadas, mientras que la tabla 3.8, muestra la matriz de sesgo A.

3.1.2.- DISCUSION DE LOS DISEÑOS PROPUESTOS

De lo expuesto en los apartados anteriores, cabe concluir la superioridad de los diseños axiales para la estimación de superficies de respuesta de primer orden, frente a los demás diseños examinados. En efecto, en lo que se refiere al número de experimentos a repetir en el caso de que la ecuación estimada fuese no significativa, los diseños axiales muestran una flexibilidad no comparable con la de ningún otro diseño, al per

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5
2,449	0,000	0,000	0,000	0,000
2,449	0,000	0,000	0,000	0,000
0,000	2,449	0,000	0,000	0,000
0,000	2,449	0,000	0,000	0,000
0,000	0,000	2,449	0,000	0,000
0,000	0,000	2,449	0,000	0,000
0,000	0,000	0,000	2,449	0,000
0,000	0,000	0,000	2,449	0,000
0,000	0,000	0,000	0,000	2,449
0,000	0,000	0,000	0,000	2,449
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
0,000	0,000	0,000	0,000	0,000

Tabla 3.7

Diseño axial.
Matriz de diseño.

	B11	B22	B33	B44	B55	B12	B13	B14	B15	B23	B24	B25	B34	B35	B45
B0	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B1	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B2	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B3	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B4	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B5	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Tabla 3.8
 Diseño axial. Matriz de sesgo.

mitir la contracción selectiva del intervalo experimental de una sola variable. Así pues, repitiendo tan solo dos experimentos, es posible la estimación de una nueva ecuación. A partir de ella se tomará la decisión de repetir dos experimentos más. o caso de obtenerse ya la ecuación significativa, seguir adelante con la investigación propuesta.

Cabe señalar además la extremada sencillez del cálculo necesario para la obtención de la ecuación y del análisis de varianza consiguiente, que se deriva de la especial ortogonalidad de la matriz de diseño. Debe pensarse además que, aún en el caso más desfavorable - repetición finalmente completa de la totalidad de los puntos del diseño axial inicial - la cifra de experimentos resulta comparable con la de los demás diseños, - los cuales no poseen la opción de la repetición selectiva por variables. Obsérvese al efecto la tabla 3.9 que muestra el número de puntos experimentales a repetir en los casos de obtención de ecuaciones estadísticamente no significativas, con los distintos diseños aquí estudiados. Debe mencionarse asimismo, que se ha supuesto que la segunda ecuación ajustada resulta significativa, y -- que de cumplirse contrariamente que la ecuación resultase no significativa, todavía resultan más ventajosos los diseños axiales.

En lo que se refiere al sesgo de los coeficientes estimados (tablas 3.2, 3.4, 3.6, y 3.8), los diseños axiales muestran aquí también su superioridad, - puesto que, al igual que ocurre con los diseños factoriales y fraccionados adecuados, el sesgo es nulo para todos los coeficientes que estiman salvo el estimado de b_0 .

Otro detalle importante es el relativo al número de puntos necesarios para completar un diseño a--

k	Simplex combinado	Fraccionado combinado	Axial	Factorial fraccionado
2	3	-	2 0 4	4
3	4	4	2 0 4 0 6	8
4	5	8	2 0 4 0 6 0 8	16
5	6	8	2 0 4 0 6 0 8 0 10	16

Tabla 3.9

Número de puntos a repetir en la aplicación secuencial de los diseños en los distintos espacios k - dimensionales.

xial. En efecto, $2k$ puntos, más los centrales que se de
see, es un número muy apropiado, acercándose al valor re
comendado por Draper (13).

Otra ventaja que por su singularidad merece
ser destacada, es la que poseen los diseños axiales,
al permitir estudiar una nueva variable sin tener que, -
para ello, repetir un número de puntos igual a los del
diseño. En efecto la adición de dos nuevos puntos expe
rimentales permite el ajuste de una nueva ecuación en el
espacio $k+1$ - dimensional, siendo k la dimensión del es-
pacio primitivo.

Al margen de lo expuesto, conviene asimismo
constatar, que los diseños axiales constituyen una ba
se desde la cual es posible la construcción de un diseño
apto para la estimación de una ecuación de segundo orden.
Aunque este no sea el objetivo que se ha propuesto para
este tipo de diseño, se ha mencionado este hecho como --
prueba de su bondad, según las normas expuestas en el a-
partado 1.2.2.

Como última ventaja de los diseños axia--
les, es necesario destacar que permiten una estimación u
niforme del error experimental, sin tener que, para ello,
duplicar la totalidad de los puntos del diseño. Esto es
así ya que resulta posible duplicar los experimentos co-
rrespondientes a un eje coordenado, sin que el diseño --
pierda su ortogonalidad.

Los diseños Simplex combinados son los --
que siguen al axial en cuanto a número de puntos a repe-
tir cuando los desajustes son significativos. Estos di
seños presentan el inconveniente frente a los demás de -
la tabla 3.9, de su mayor sesgo. El número total de ex-
perimentos, $2k+2$ puntos centrales, se puede considerar

adecuado al criterio de Draper.

Los diseños Simplex combinados presentan además la ventaja de constituir una base sobre la cual - es posible la formación de un diseño de segundo orden (a partado 3.2.2).

En los diseños factoriales fraccionados - combinados, el número de puntos a repetir al obtener una ecuación no significativa es superior al de los diseños Simplex combinados, aunque resulta inferior al necesario en los diseños factoriales o fraccionados adecuados convencionales. En lo referente al sesgo, la relación es, sin embargo, inversa, estando los coeficientes de primer orden más sesgados que en los diseños factoriales o fraccionados adecuados convencionales, pero menos que en los diseños Simplex combinados.

Globalmente las ventajas de estos dos últimos diseños son muy discutibles frente al diseño axial.

3.2.- SUPERFICIES DE SEGUNDO ORDEN

Los diseños pertenecientes a este grupo, han sido ampliamente estudiados en la bibliografía, por lo que la obtención de un nuevo diseño con un número razonable de puntos resulta prácticamente irrealizable. - No obstante, el detenido estudio que se ha realizado de los mismos ha revelado aspectos de cierta importancia para su aplicación secuencial.

El estudio se ha realizado sobre diseños de segundo orden en dos dimensiones debido a que éste es el espacio en donde este tipo de diseños puede presentar mayor utilidad: inferior número de puntos experimentales, posibilidad de representación gráfica, etc..

3.2.1.- DISEÑOS ROTATORIOS DE SEGUNDO ORDEN EN ESPACIOS BIDIMENSIONALES

De los diseños propuestos en la bibliografía, el más utilizado, sin duda alguna, es el diseño factorial compuesto, que cuando es ortogonal y rotatorio -- presenta un total de dieciseis puntos experimentales, -- distribuidos ocho en el centro y ocho formando un octógono regular. No obstante, y según lo expuesto en el apartado 1.2.10.3, las combinaciones de anillos concéntricos constituyen asimismo diseños rotatorios de segundo orden. En este apartado se estudia su aplicación secuencial.

Si se dispone de dos anillos concéntricos con n puntos experimentales cada uno de ellos, y n_0 puntos en el centro, y la ecuación ajustada resulta globalmente no significativa, se puede disponer de un nuevo di

seño análogo, cubriendo una zona experimental más reducida, con la sola repetición de los n puntos situados en el anillo de mayor radio, situándolos esta vez en un anillo de radio inferior a los anteriores. La figura 3.3 - expone esta situación en el caso de un diseño formado -- por la combinación de hexágonos.

Si se consideran dos anillos concéntricos con un número de puntos n igual en ambos, $n \geq 5$, y con una determinada razón de radios r se puede deducir a partir de la ecuación 1.84 la siguiente:

$$r = \sqrt{\frac{2n\lambda_4 - \{(2n\lambda_4)^2 - (2n(1-\lambda_4) + n_0)^2\}^{1/2}}{2n(1-\lambda_4) + n_0}} \quad (3.22)$$

Esta ecuación relaciona la razón de radios r necesaria -- para la obtención de un diseño rotatorio con un determinado número de puntos centrales n_0 y con un valor de λ_4 fijo. Según lo expuesto en 1.2.10.3 el valor de λ_4 óptimo para un diseño rotatorio es de 0,78 y para un diseño ortogonal y rotatorio, λ_4 debe ser igual a la unidad. El estudio se ha realizado para las dos posibilidades.

Si se utiliza el valor λ_4 unidad (diseño ortogonal y rotatorio) se obtiene para r :

$$r = \sqrt{\frac{2n - \{(2n)^2 - n_0^2\}^{1/2}}{n_0}} \quad (3.23)$$

La matriz de diseño general para un dise-

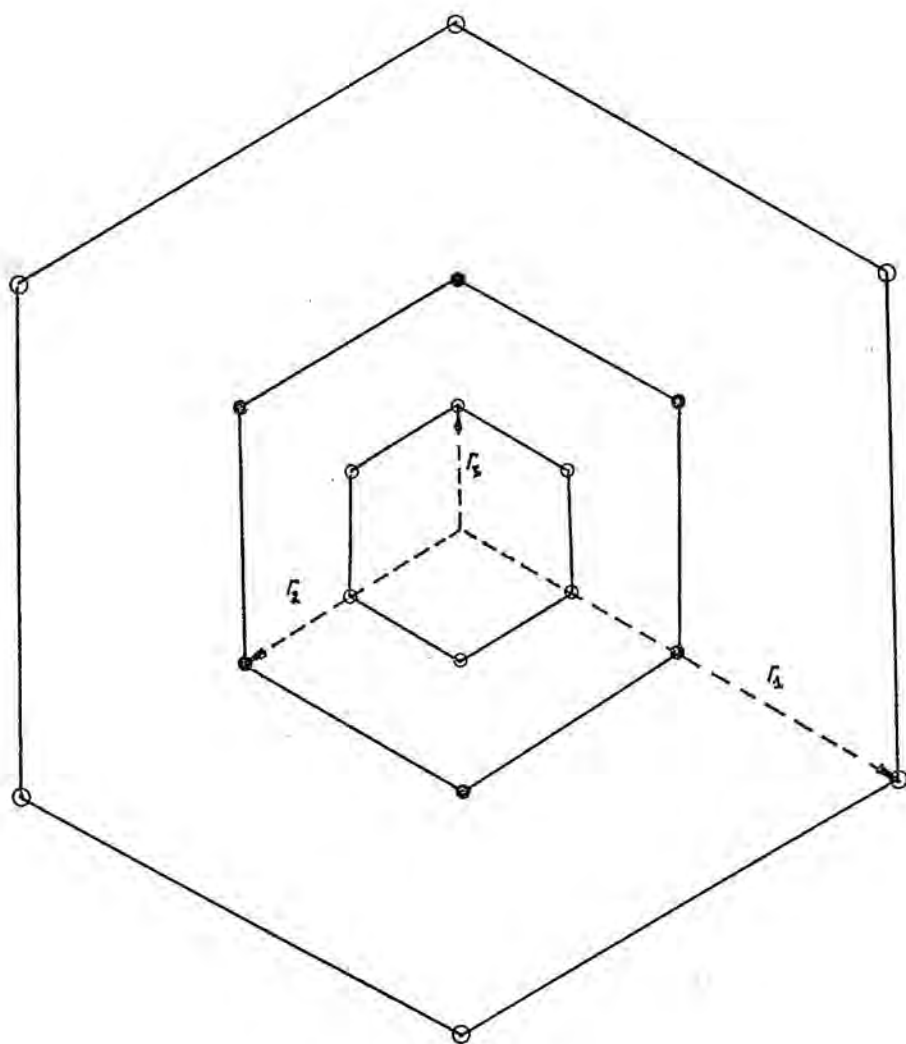


Figura 3.3

Diseño hexagonal combinado. Secuencia de aplicación

ño de N puntos, formado por combinación de anillos concéntricos se expone en la tabla 3.10. En la misma figura igualmente el factor f por el que se han multiplicado los elementos de la matriz para estandarizarla.

En los apartados siguientes se estudian y discuten separadamente los diseños formados por combinación de pentágonos, hexágonos, heptágonos, y octógonos. Las matrices de precisión y de sesgo no se han incluido en la discusión, excepto la de sesgo para los diseños --pentagonales combinados, debido a ser comunes para todos los diseños rotatorios de segundo orden estandarizados --según las ecuaciones 1.4 y 1.5, y con momentos de quinto orden nulos (esta última circunstancia es precisamente la que no se cumple en los diseños formados por combinación de pentágonos). Las tablas 3.11 y 3.12, muestran estas matrices para este tipo de diseños (rotatorios $\lambda_4=0,78$, y ortogonales y rotatorios $\lambda_4=1,00$). Todas las matrices deducidas responden a la teoría general expuesta en el apartado 1.2.10.3.

3.2.1.1.- Combinación de pentágonos

Para $n=5$ se tendrán combinaciones de pentágonos. La ventaja principal de esta combinación reside en el hecho de poseer un escaso número de puntos necesarios para la obtención de un nuevo diseño rotatorio en su aplicación secuencial. No obstante, el sesgo derivado de no poseer todos los momentos de quinto orden nulos, constituye su principal inconveniente. La tabla 3.13 expone la matriz de sesgo para un diseño pentagonal combinado rotatorio y rotatorio ortogonal.

La tabla 3.14 muestra distintos valores -- de la razón de radios r para distintos valores de n_0 ---

$f \sin(2\pi/n)$	$f \cos(2\pi/n)$
$f \sin(2(2\pi/n))$	$f \cos(2(2\pi/n))$
.	.
.	.
$f \sin((n-1)(2\pi/n))$	$f \cos((n-1)(2\pi/n))$
$f \sin(2\pi)$	$f \cos(2\pi)$
$f r \sin(2\pi/n)$	$f r \cos(2\pi/n)$
$f r \sin(2(2\pi/n))$	$f r \cos(2(2\pi/n))$
.	.
.	.
$f r \sin((n-1)(2\pi/n))$	$f r \cos((n-1)(2\pi/n))$
0	0
.	.
.	.
0	0

$$f = N^{1/2} / \left\{ (1+r^2) \sum_{i=1}^n \sin^2(2\pi i/n) \right\}^{1/2}$$

r = razón de radios

n = número de puntos en el anillo

N = número total de puntos

Tabla 3.10

Matriz de diseño estandarizada para diseños formados por combinación de anillos concéntricos.

	B0	B1	B2	B11	B22	B12
B0	2,76	0,00	0,00	-0,88	-0,88	0,00
B1	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B2	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00
B11	-0,88	0,00	0,00	0,76	0,00	0,00
B22	-0,88	0,00	0,00	0,00	0,76	0,00
B12	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,28

Matriz de precisión

	B111	B222	B112	B122
B0	0,00	0,00	0,00	0,00
B1	2,35	0,00	0,00	0,78
B2	0,00	2,35	0,78	0,00
B11	0,00	0,00	0,00	0,00
B22	0,00	0,00	0,00	0,00
B12	0,00	0,00	0,00	0,00

Matriz de sesgo

Tabla 3.11

Matrices características para los diseños rotatorios de segundo orden ($\lambda_4=0,78$, $k=2$)

	B0	B1	B2	B11	B22	B12
B0	2,00	0,00	0,00	-0,50	-0,50	0,00
B1	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00	0,00
B2	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,00
B11	-0,50	0,00	0,00	0,50	0,00	0,00
B22	-0,50	0,00	0,00	0,00	0,50	0,00
B12	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	1,00

Matriz de precisión

	B111	B222	B112	B122
B0	0,00	0,00	0,00	0,00
B1	3,00	0,00	0,00	1,00
B2	0,00	3,00	1,00	0,00
B11	0,00	0,00	0,00	0,00
B22	0,00	0,00	0,00	0,00
B12	0,00	0,00	0,00	0,00

Matriz de sesgo

Tabla 3.12

Matrices características para los diseños ortogonales y rotatorios de segundo orden ($\lambda_4=1,00$, $k=2$)

	B111	B222	B112	B122
B0	0,00	0,00	0,00	0,00
B1	2,35	0,00	0,00	0,78
B2	0,00	2,35	0,78	0,00
B11	0,47	0,00	0,00	-0,47
B22	-0,47	0,00	0,00	0,47
B12	0,00	0,93	-0,93	0,00

Diseño rotatorio ($\lambda_4=0,78$)

	B111	B222	B112	B122
B0	0,00	0,00	0,00	0,00
B1	3,00	0,00	0,00	1,00
B2	0,00	3,00	1,00	0,00
B11	0,52	0,00	0,00	-0,52
B22	-0,52	0,00	0,00	0,52
B12	0,00	1,04	-1,04	0,00

Diseño ortogonal y rotatorio ($\lambda_4=1,00$)

Tabla 3.13

Matrices de sesgo para diseños pentagonales combinados ($n_0 = 2$).

frente a un valor de $\lambda_4=0,78$ y otro de $\lambda_4=1,00$, obtenidos todos ellos al hacer uso de las ecuaciones 3.22 y 3.23. Estos mismos valores informan sobre la reducción del intervalo experimental, cuando es necesario proceder a una reducción del mismo.

n_0	1	2	3	4	5
$r(\lambda_4=0,78)$	0,459	0,536	0,613	0,697	0,806
$r(\lambda_4=1,00)$	0,224	0,318	0,392	0,457	0,518

Tabla 3.14
Combinación de pentágonos
 Valores de la relación de radios en función del número de puntos centrales.

3.2.1.2.- Combinación de hexágonos

Para $n=6$ se obtienen combinaciones de hexágonos, que además de poseer un pequeño número de puntos experimentales, sus estimados están libres de sesgo debido a posibles coeficientes de tercer orden.

La tabla 3.15 muestra distintos valores de la razón de radios r para distintos valores de n_0 y

frente a valores de $\lambda_4=0,78$ y $\lambda_4=1,00$, obtenidos todos ellos al hacer uso de las ecuaciones 3.22 y 3.23. Estos mismos valores informan sobre la reducción del intervalo experimental, cuando se hace necesario proceder a una reducción del mismo.

n_0	1	2	3	4	5
$r(\lambda_4=0,78)$	0,445	0,511	0,574	0,639	0,712
$r(\lambda_4=1,00)$	0,204	0,290	0,356	0,414	0,467

Tabla 3.15

Combinación de hexágonos

Valores de la relación de radios en función del número de puntos centrales.

3.2.1.3.- Combinación de heptágonos

Para $n=7$ se obtienen combinaciones de heptágonos que proporcionan asimismo estimados libres de sesgo. Son altamente interesantes debido a que, como se estudia en los apartados dedicados a diseños de tercer orden, son capaces de estimar ecuaciones de tercer orden. La aplicación secuencial es por lo demás totalmente aná-

loga, con la ventaja adicional antes mencionada.

La tabla 3.16 muestra distintos valores de la razón de radios para distintos valores de n_0 frente a valores de $\lambda_4=0,78$ y $\lambda_4=1,00$, obtenidos todos ellos al hacer uso de las ecuaciones 3.22 y 3.23. Estos mismos valores informan sobre la reducción del intervalo experimental, cuando es necesario proceder a una reducción del mismo.

n_0	1	2	3	4	5
$r(\lambda_4=0,78)$	0,436	0,492	0,547	0,603	0,659
$r(\lambda_4=1,00)$	0,189	0,268	0,329	0,382	0,430

Tabla 3.16

Combinación de heptágonos

Valores de la relación de radios en función del número de puntos centrales.

3.2.1.4.- Combinación de octógonos

Para $n=8$ se obtienen combinaciones de octógonos, las cuales, al igual que las de heptágonos, es-

timan ecuaciones cúbicas. No obstante, presentan la ventaja de obtener estimados de tercer orden con un sesgo - inferior al obtenido con las combinaciones de heptágonos (este hecho se estudia adecuadamente en el apartado 3.2. 2). Además, la mayor regularidad de las figuras que los forman trae consigo una simplificación en los cálculos - necesarios para la obtención de las ecuaciones.

n_0	1	2	3	4	5
$r(\lambda_4=0,78)$	0,428	0,478	0,526	0,574	0,623
$r(\lambda_4=1,00)$	0,177	0,250	0,308	0,356	0,400

Tabla 3.17

Combinación de octógonos

Valores de la relación de radios en fun
ción del número de puntos centrales.

La tabla 3.17 muestra distintos valores - de la razón de radios r para distintos valores de n_0 y - frente a valores de $\lambda_4=0,78$ y $\lambda_4=1,00$, obtenidos todos e- llos al hacer uso de las ecuaciones 3.22 y 3.23. Estos mismos valores informan sobre la reducción del intervalo experimental, cuando es necesario proceder a una reduc- ción del mismo.

3.2.2.- DISCUSION DE LOS DISEÑOS PROPUESTOS

De lo expuesto en los anteriores apartados se puede concluir la utilización ventajosa de los diseños formados por combinación de anillos concéntricos frente a la del diseño factorial compuesto. Matemáticamente, a excepción hecha de los diseños formados por combinación de pentágonos, todos los diseños aquí propuestos son equivalentes, puesto que poseen matrices de precisión y de sesgo idénticas (naturalmente separando en dos grupos los diseños rotatorios y los diseños ortogonales y rotatorios). Pero el menor número de puntos experimentales a realizar que en cada caso representa la aplicación de los diseños formados por combinación de hexágonos y heptágonos les confiere a este respecto, una cierta superioridad.

Los diseños formados por combinación de hexágonos presentan la ventaja adicional de permitir el ajuste de una ecuación de primer orden, antes de completar la totalidad de los puntos que los forman. Esto es así en efecto, debido a que los tres puntos alternados de un hexágono forman un diseño Simplex, y el conjunto de los dos Simplex, provenientes de los dos hexágonos, un diseño Simplex combinado (apartado 3.1.1.1), el cual constituye un diseño adecuado para la estimación de ecuaciones de primer orden. La figura 3.4 muestra la construcción de un diseño hexagonal combinado a partir de un diseño Simplex combinado.

La aplicación secuencial de los diseños pentagonales combinados adquiere su máxima importancia en los casos en que de antemano se conoce la poca influencia de los coeficientes de tercer orden, mientras que la combinación de octógonos será útil en el caso en

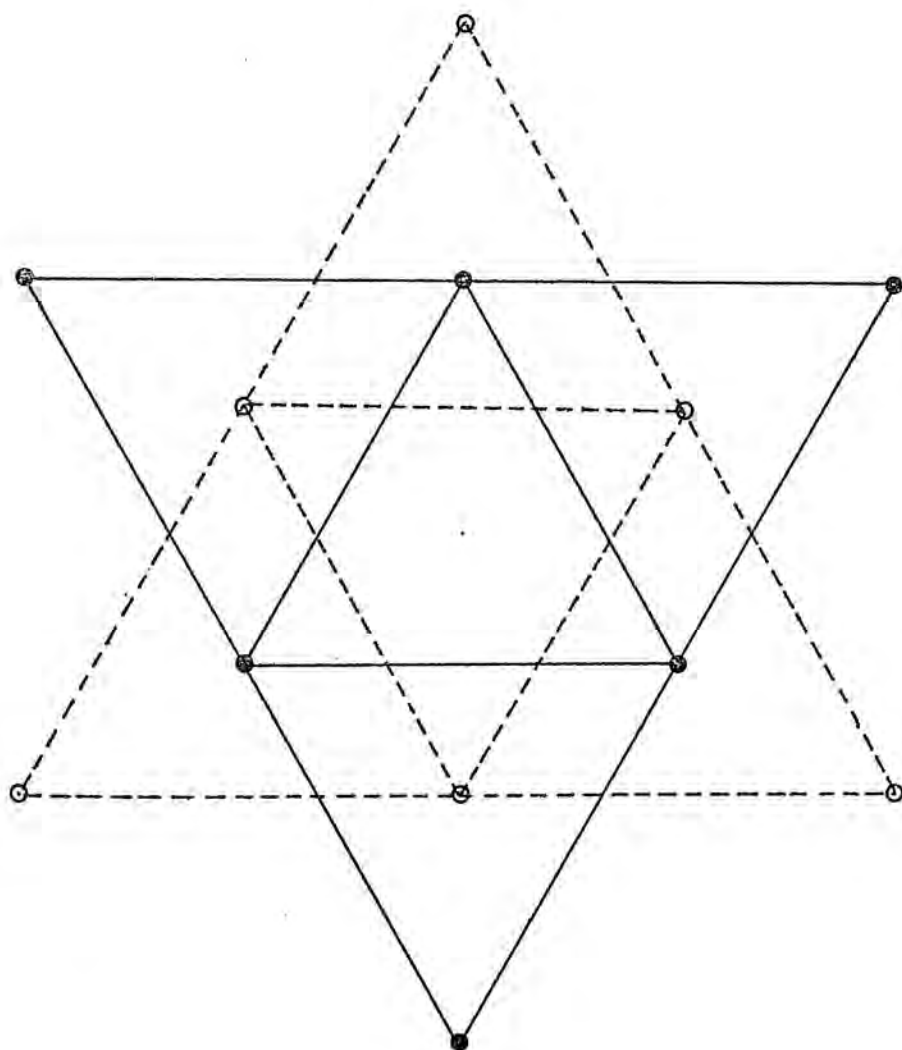


Figura 3.4

*Formación de un diseño hexagonal combinado
a partir de dos diseños Simplex combinados*

que se desee el ajuste de una ecuación significativa dentro de una determinada región experimental, ya que la utilización de diseños octogonales combinados permite, al igual que los heptagonales combinados, el ajuste de ecuaciones de tercer orden. Por otra parte, la utilización de diseños octogonales combinados permite el ajuste de ecuaciones de primer orden, pues básicamente están formados por la combinación de diseños axiales y factoriales. Este hecho, así como el de su completa utilización secuencial, se estudia en el apartado 6.

La elección de uno u otro diseño de los que aquí se proponen dependerá fundamentalmente, como se observa, de la situación experimental concreta, y deberá ser el experimentador el que, en su caso, tome la decisión.

Finalmente cabe mencionar que los diseños rotatorios de segundo orden formados por n puntos distribuidos en un anillo y n_0 situados en el centro, constituyen diseños cuya secuencia de aplicación es análoga a los aquí propuestos, en lo referido al número de puntos a repetir cuando la ecuación ajustada no es significativa. Sin embargo, los aquí expuestos presentan la ventaja de una exploración más completa del espacio experimental, así como, los dos últimos, la de una posible utilización como diseños de tercer orden.

3.3.- SUPERFICIES DE TERCER ORDEN

Es indudable la importancia que pueda tener, en ciertas ocasiones, el ajuste de una ecuación de tercer orden, en especial en los casos en que es necesario establecer una relación estadísticamente significativa entre las variables dentro de una determinada región. Ciertamente, no se ha prestado excesiva atención al estudio de las superficies de tercer orden, desarrollándose tan solo algunos aspectos teóricos que los diseños experimentales correspondientes pueden presentar, pero dejando un tanto al margen el problema de su utilización así como el de su posterior análisis. Es por esto que se ha iniciado la presente investigación, al objeto de cubrir esta falta de información, desarrollando un tratamiento más completo de estos diseños, tanto en los aspectos teóricos, como en los aspectos prácticos.

Dado el elevado número de puntos experimentales que son necesarios para la construcción de diseños rotatorios de tercer orden, se ha limitado este estudio a espacios bidimensionales.

3.3.1.- DISEÑOS ROTATORIOS DE TERCER ORDEN EN ESPACIOS BIDIMENSIONALES

Como se mencionó en el apartado 1.2.10.4, los diseños de tercer orden rotatorios en espacios bidimensionales deben estar constituidos por dos o más anillos concéntricos, cada uno de ellos con un número de puntos experimentales igual o superior a siete.

Evidentemente las combinaciones formadas

por:

- i) octógono - octógono
- ii) heptágono - heptágono
- iii) combinación mixta octógono - heptágono

dado su menor número de puntos experimentales en comparación con cualquier otra, son las que resultan más atractivas desde un punto de vista práctico. Por consiguiente son éstas las combinaciones que se ha decidido estudiar.

En este estudio, se pretenden dos objetivos en cierto modo conjugados:

1º) Una distribución de la varianza de las respuestas estimadas lo más favorable posible -- (valor mínimo y uniformidad respecto al radio del diseño).

2º) Un sesgo mínimo en los coeficientes estimados.

Asimismo se desea explicitar para simplificar su utilización, el cálculo preciso para la estimación de la ecuación de tercer orden.

Para ello, y en los apartados que siguen, se estudia la variación de las propiedades características del diseño - varianza y sesgo - con la razón de los radios de los anillos en el diseño y con el número de puntos replicados en el centro del mismo.

3.3.1.1.- Distribución de la varianza

Como se expuso en el apartado 1.2.10.4, - la matriz de precisión $N(\underline{X}'\underline{X})^{-1}$ para un diseño rotatorio de tercer orden viene dada por las ecuaciones 1.111, --- 1.112, 1.113 y 1.114. En el caso particular de espacios bidimensionales, la matriz se simplifica, y la expresión resultante se muestra en la tabla 3.16, en donde:

$$A = 1/2\lambda_4(4\lambda_4 - 2) \quad (3.24)$$

$$B = 1/6(6\lambda_6 - 4\lambda_4^2) \quad (3.25)$$

Si se multiplica la matriz $(\underline{X}'\underline{X})^{-1}$ a iz-- quierda y a derecha por el vector derivado de tercera - potencia y su transpuesto, es decir, si se efectúa el -- producto $\mathbf{x}'|3|(\underline{X}'\underline{X})^{-1}\mathbf{x}|3|$ se obtiene fácilmente una ex-- presión para la varianza del diseño, puesto que para di-- seños rotatorios:

$$V(\rho) = NV(y_{\mathbf{x}})/\sigma^2 = \mathbf{x}'|3|N(\underline{X}'\underline{X})^{-1}\mathbf{x}|3| \quad (3.26)$$

Efectuado el producto indicado en la ecuación anterior, y las oportunas simplificaciones, se obtiene para la fun-- ción varianza del diseño la siguiente expresión:

$$V(\rho) = 8A\lambda_4 + (36\lambda_6 B - 4A\lambda_4)\rho^2 + \dots$$

$$+ \{ (3\lambda_4 - 1)A - 12\lambda_4 B \} \rho^4 + (3 - \frac{\lambda_4^2}{\lambda_6}) B \rho^6 \quad (3.27)$$

Sustituyendo los valores de A y de B, indicados en las ecuaciones 3.24 y 3.25, resulta:

$$V(\rho) = C_0 + C_2 \rho^2 + C_4 \rho^4 + C_6 \rho^6 \quad (3.28)$$

en donde:

$$C_0 = \frac{2}{2\lambda_4 - 1} \quad (3.29)$$

$$C_2 = \frac{3\lambda_6}{3\lambda_6 - 2\lambda_4} - \frac{1}{2\lambda_4 - 1} \quad (3.30)$$

$$C_4 = \frac{3\lambda_4 - 1}{4\lambda_4(2\lambda_4 - 1)} - \frac{\lambda_4}{3\lambda_6 - 2\lambda_4} \quad (3.31)$$

$$C_6 = \frac{1}{12(3\lambda_6 - 2\lambda_4^2)} (3 - \frac{\lambda_4^2}{\lambda_6}) \quad (3.32)$$

Conocidas las expresiones que relacionan el número de puntos del diseño y su distribución con los parámetros característicos del mismo λ_4 y λ_6 , ecuaciones 128 y 129 que a continuación se reproducen:

$$\lambda_4 = \frac{N (n_1 \rho_1^4 + n_2 \rho_2^4)}{2 (n_1 \rho_1^2 + n_2 \rho_2^2)^2} \quad (3.33)$$

$$\lambda_6 = \frac{N^2 (n_1 \rho_1^6 + n_2 \rho_2^6)}{6 (n_1 \rho_1^2 + n_2 \rho_2^2)^3} \quad (3.34)$$

y establecido el tipo de diseño, es decir, conocido el número de puntos n_1 y n_2 en cada uno de los anillos, y la relación r entre sus radios,

$$r = \rho_1/\rho_2 \quad (3.35)$$

así como el número de puntos centrales n_0 , se podrá conocer rápidamente la distribución de varianza para el diseño.

Para el estudio de esta distribución, se ha efectuado la integración de la función $V(\rho)$ entre los valores de ρ comprendidos entre 0 y 1 (no se han considerado valores mayores para ρ debido a que la varianza aumenta de forma rápida y considerable al alejar los puntos del diseño). La integración analítica conduce a la expresión:

$$V_m(\rho) = \int_0^1 V(\rho) d\rho = C_0 + [C_2/3]\rho^3 + [C_4/5]\rho^5 + [C_6/7]\rho^7 \quad (3.36)$$

Por $V_m(\rho)$ se ha representado la varianza media integral de las respuestas estimadas en puntos situados a una distancia del origen comprendida entre 0 y 1, puesto que, como puede observarse, coincide con el valor de la integral.

3.3.1.2.- Sesgo de los coeficientes

Tal como se indicó en el apartado 1.2.3, si el modelo supuesto - en este caso el de tercer orden - resulta inadecuado dentro de la región estudiada, los coeficientes de tercer orden vendrán sesgados por los su

puestos nulos de cuarto orden. El sesgo viene expresado en forma matricial por la ecuación 1.15 que, de nuevo, se reproduce a continuación:

$$\varepsilon(\underline{B}) = \underline{\beta} + \underline{A}\underline{\beta}_1 \quad (3.37)$$

donde \underline{A} es la matriz de sesgo, obtenida al efectuar el producto matricial siguiente:

$$\underline{A} = (\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{X}'\underline{X}_1 \quad (3.38)$$

$\underline{\beta}_1$, es el vector de los coeficientes de cuarto orden, -- mientras que $\underline{\beta}$ es el de los de tercero.

Para un diseño rotatorio de tercer orden se dispone de la expresión de la matriz $N^{-1}(\underline{X}'\underline{X})^{-1}$ (tabla 3.16). Para la obtención de la matriz de sesgo \underline{A} , -- bastará pues obtener otra expresión para $N^{-1}(\underline{X}'\underline{X}_1)$, el producto de la matriz transpuesta de las variables independientes, por la matriz de las variables independientes adicional, partido por el número total de puntos experimentales. Se ha procedido pues a efectuar este producto, cuyo resultado queda reflejado en la tabla 3.17. La matriz $N^{-1}(\underline{X}'\underline{X}_1)$ contiene todos los momentos de cuarto a séptimo orden del diseño. En este punto resulta fácil obtener la matriz \underline{A} :

$$\underline{A} = N(\underline{X}'\underline{X})^{-1}N^{-1}(\underline{X}'\underline{X}_1) \quad (3.39)$$

El resultado de este producto no se ha tabulado, ya que se ha procedido directamente a explicitar la ecuación -- 3.37 efectuando las operaciones matriciales allí indicadas. El resultado de las mismas proporciona el sesgo de los coeficientes de tercer orden debido a los de cuarto

$8\lambda_4$	0	0	$-2A\lambda_4$	$-2A\lambda_4$	0	0	0	0
0	$36\lambda_6 B$	0	0	0	0	$-6\lambda_4 B$	0	$-6\lambda_4 B$
0	0	$36\lambda_6 B$	0	0	0	$-6\lambda_4 B$	$-6\lambda_4 B$	0
$-2A\lambda_4$	0	0	$(3\lambda_4 - 1)A$	$(1 - \lambda_4)A$	0	0	0	0
$-2A\lambda_4$	0	0	$(1 - \lambda_4)A$	$(3\lambda_4 - 1)A$	0	0	0	0
0	0	0	0	0	$1/\lambda_4$	0	0	0
0	$-6\lambda_4 B$	0	0	0	0	$(3 - \frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})B$	0	$3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6} - 1)B$
0	0	$-6\lambda_4 B$	0	0	0	$(3 - \frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})B$	$3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6} - 1)B$	0
0	0	$-6\lambda_4 B$	0	0	0	$3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6} - 1)B$	$3(5 - 3\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})B$	0
0	$-6\lambda_4 B$	0	0	0	0	$3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6} - 1)B$	0	$3(5 - 3\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})B$

Tabla 3.16

Matriz de precisión para diseños rotatorios de tercer orden en dos dimensiones

11110	22220	11120	12220	11220
11111	12222	11112	11222	11122
11112	22222	11122	12222	11222
111111	112222	111112	111222	111122
111122	222222	111222	122222	112222
111112	122222	111122	112222	111222
1111111	1112222	1111112	1111222	1111122
1111222	2222222	1112222	1222222	1122222
1111112	1122222	1111122	1112222	1111222
1111122	1222222	1111222	1122222	1112222

Tabla 3.17

Matriz $\underline{X}'\underline{X}_1^{-1}$ para un diseño de tercer orden

y queda reflejado en la tabla 3.18.

3.3.1.3.- Puntos centrales y relación de radios

El estudio de los diseños rotatorios de tercer orden ha consistido hasta este punto en la obtención de sendas expresiones para la varianza media integral de las respuestas estimadas, así como para el sesgo de los coeficientes de la ecuación ajustada.

Evidentemente, tanto el sesgo como la varianza varían con la relación de radios r entre los dos anillos que componen el diseño, y con el número de puntos centrales que se consideren. Por otra parte, para completar el estudio y alcanzar el objetivo propuesto, se hace necesaria la elección de valores de r y n_0 , que proporcionen las bases para la construcción de diseños óptimos de tercer orden. Dado que además, esta elección viene determinada por el tipo de combinación de anillos que se esté considerando, el estudio debe conducirse de manera particular para cada tipo de ellas.

3.3.1.4.- Estudio particular de los diseños

La dependencia de la varianza y el sesgo con los factores relación de radios y número de puntos centrales, se ha estudiado de forma numérica para cada una de las combinaciones consideradas. Para ello se han tabulado la varianza media integral $V_m(\rho)$ de las respuestas estimadas en puntos situados a una distancia del origen comprendida entre 0 y 1, y los valores de los coeficientes de sesgo unidos a los distintos coeficientes de

$$\begin{aligned} \epsilon(b_0) = & \beta_0 + 8\lambda_4^2 (|11110| \beta_{1111} + |22220| \beta_{2222} + |11120| \beta_{1112} + |12220| \beta_{1222} + |11220| \beta_{1122}) - \\ & - 2\lambda_4 \{ (|111111| + |111122|) \beta_{1111} + (|112222| + |222222|) \beta_{2222} + (|111112| + |111222|) \beta_{1122} + \\ & + (|111222| + |122222|) \beta_{1222} + (|111122| + |112222|) \beta_{1122} \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \epsilon(b_1) = & \beta_1 + 36\lambda_6 B (|11111| \beta_{1111} + |22221| \beta_{2222} + |11112| \beta_{1112} + |11222| \beta_{1222} + |11122| \beta_{1122}) - \\ & - 6\lambda_4 B \{ (|111111| + |111122|) \beta_{1111} + (|111222| + |122222|) \beta_{2222} + \\ & + (|111112| + |111222|) \beta_{1112} + (|111122| + |112222|) \beta_{1222} + (|111112| + |111222|) \beta_{1122} \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \epsilon(b_2) = & \beta_2 + 36\lambda_6 B (|11112| \beta_{1111} + |22222| \beta_{2222} + |11122| \beta_{1112} + |12222| \beta_{1222} + |11222| \beta_{1122}) - \\ & - 6\lambda_4 B \{ (|111122| + |111112|) \beta_{1111} + (|222222| + |112222|) \beta_{2222} + \\ & + (|122222| + |111222|) \beta_{1222} + (|111222| + |111122|) \beta_{1112} + (|112222| + |111122|) \beta_{1122} \} \end{aligned}$$

Tabla 3.18

Sesgo de los coeficientes estimados de una ecuación de tercer orden

$$\begin{aligned}
\varepsilon(b_{11}) &= \beta_{11} - 2A\lambda_4(|11110|\beta_{1111} + |22220|\beta_{2222} + |11120|\beta_{1112} + |12220|\beta_{1222} + |11220|\beta_{1122}) + \\
&+ (3\lambda_4 - 1)A(|11111|\beta_{1111} + |11222|\beta_{2222} + |111112|\beta_{1112} + |111222|\beta_{1222} + |111122|\beta_{1122}) + \\
&+ (1 - \lambda_4)A(|11112|\beta_{1111} + |22222|\beta_{2222} + |11122|\beta_{1112} + |12222|\beta_{1222} + |11222|\beta_{1122}) \\
\varepsilon(b_{22}) &= \beta_{22} - 2A\lambda_4(|11110|\beta_{1111} + |22220|\beta_{2222} + |11120|\beta_{1112} + |12220|\beta_{1222} + |11220|\beta_{1122}) + \\
&+ (1 - \lambda_4)A(|11111|\beta_{1111} + |11222|\beta_{2222} + |111112|\beta_{1112} + |111222|\beta_{1222} + |111122|\beta_{1122}) + \\
&+ (3\lambda_4 - 1)A(|11112|\beta_{1111} + |22222|\beta_{2222} + |11122|\beta_{1112} + |12222|\beta_{1222} + |11222|\beta_{1122}) \\
\varepsilon(b_{12}) &= \beta_{12} + (1/\lambda_4)(|11112|\beta_{1111} + |12222|\beta_{2222} + |11112|\beta_{1112} + |11222|\beta_{1222} + |11122|\beta_{1122}) \\
\varepsilon(b_{111}) &= \beta_{111} - 6\lambda_4 B(|11111|\beta_{1111} + |12222|\beta_{2222} + |11112|\beta_{1112} + |11222|\beta_{1222} + |11122|\beta_{1122}) + \\
&+ (3 - \frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})B(|111111|\beta_{1111} + |111222|\beta_{2222} + |111112|\beta_{1112} + |111122|\beta_{1222} + |111222|\beta_{1122}) + \dots
\end{aligned}$$

Tabla 3.18 (continuación)

$$+ |1111122|\beta_{1122}\rangle + 3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6}-1)B(|1111122|\beta_{1111} + |1222222|\beta_{2222} + |1111222|\beta_{1112}$$

$$+ |1122222|\beta_{1222} + |1112222|\beta_{1122}\rangle$$

$$\epsilon(b_{222}) = \beta_{222} - 6\lambda_4 B(|11112|\beta_{1111} + |2222|\beta_{2222} + |11122|\beta_{1112} + |12222|\beta_{1222} + |11222|\beta_{1122}) +$$

$$+ (3-\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})B(|1111222|\beta_{1111} + |2222222|\beta_{2222} + |1112222|\beta_{1112} + |1222222|\beta_{1222} +$$

$$+ |1122222|\beta_{1122}\rangle + 3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6}-1)B(|1111112|\beta_{1111} + |1122222|\beta_{2222} + |1111122|\beta_{1112} +$$

$$+ |1112222|\beta_{1222} + |1111222|\beta_{1122}\rangle$$

$$\epsilon(b_{112}) = \beta_{112} - 6\lambda_4 B(|11112|\beta_{1111} + |22222|\beta_{2222} + |11122|\beta_{1112} + |12222|\beta_{1222} + \dots$$

Tabla 3.18 (continuación)

$$\begin{aligned}
& + |11222|\beta_{1122}\rangle + 3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6}-1)B(|111122|\beta_{1111} + |222222|\beta_{2222} + |111222|\beta_{1112} + \\
& + |122222|\beta_{1222} + |112222|\beta_{1122}\rangle + 9(\frac{5}{3}\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})B(|111112|\beta_{1111} + |222222|\beta_{2222} + \\
& + |111112|\beta_{1112} + |111222|\beta_{1222} + |111122|\beta_{1122})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\epsilon(b_{122}) = & \beta_{122} - 6\lambda_4 B(|1111|\beta_{1111} + |1222|\beta_{2222} + |1112|\beta_{1112} + |1122|\beta_{1222} + |11122|\beta_{1122}) \\
& + 3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6}-1)B(|111111|\beta_{1111} + |111222|\beta_{2222} + |111112|\beta_{1112} + |111122|\beta_{1222} + \\
& + |111112|\beta_{1122}\rangle + 9(\frac{5}{3}\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})B(|111112|\beta_{1111} + |122222|\beta_{2222} + |111122|\beta_{1112} + \\
& + |112222|\beta_{1222} + |111222|\beta_{1122})
\end{aligned}$$

Tabla 3.18 (continuación)

de cuarto orden. Así, se ha partido de la ecuación 3.36 para el cálculo de $V_m(\rho)$, y de las matrices de diseño -- normalizadas -- correspondientes a la razón de radios r y al número de puntos centrales n_0 considerados -- así como de la tabla 3.18 que expone el sesgo de los coeficientes de tercer orden en función de los momentos del diseño y de sus constantes características, para el cálculo de -- los coeficientes de sesgo (la tabla 3.19 muestra la nomenclatura que se ha seguido para su tabulación):

3.3.1.4.1.- Combinación de octógonos

La tabla 3.20 muestra los valores de $V_m(\rho)$ para valores de r comprendidos entre 0,05 y 0,95, y para un número de puntos centrales que varía entre 0 y 9. Como puede observarse, la varianza media $V_m(\rho)$ disminuye -- en general al aumentar el número de puntos centrales, y en lo referente a la relación de radios, los valores óptimos -- entendiéndose como óptimos aquellos cuya varianza media integral sea mínima -- se sitúan entre 0,35 y -- 0,50, precisándose en este sentido valores más altos de r al aumentar n_0 .

Los diseños de tercer orden formados por combinación de octógonos, poseen todos los coeficientes estimados de primer y tercer orden libres de sesgo. Por el contrario, sí presentan sesgo los estimados de segundo orden, así como el término constante $\epsilon(b_0)$. La tabla 3.21 muestra los valores absolutos de los coeficientes -- de sesgo implicados, para relaciones de radio comprendidas entre 0,10 y 0,95 y para 0,2,4, y 6 puntos centrales. La nomenclatura seguida, como ya se ha mencionado, queda aclarada en la tabla 3.19. Como puede observarse, los -- coeficientes de sesgo S_1 y S_2 presentan sus valores máxi

$\epsilon(b_0)$	sesgado por	β_{1111}	Denominación	S_1
$\epsilon(b_0)$	"	" β_{2222}	"	S_1
$\epsilon(b_0)$	"	" β_{1122}	"	S_2
$\epsilon(b_{11})$	"	" β_{1111}	"	S_3
$\epsilon(b_{22})$	"	" β_{2222}	"	S_3
$\epsilon(b_{11})$	"	" β_{2222}	"	S_4
$\epsilon(b_{22})$	"	" β_{1111}	"	S_4
$\epsilon(b_{11})$	"	" β_{1122}	"	S_5
$\epsilon(b_{22})$	"	" β_{1122}	"	S_5
$\epsilon(b_{12})$	"	" β_{1112}	"	S_6
$\epsilon(b_{12})$	"	" β_{1222}	"	S_6
$\epsilon(b_{111})$	"	" β_{1111}	"	S_7
$\epsilon(b_{111})$	"	" β_{1122}	"	S_7
$\epsilon(b_{111})$	"	" β_{2222}	"	S_7
$\epsilon(b_{222})$	"	" β_{1112}	"	S_7
$\epsilon(b_{222})$	"	" β_{1222}	"	S_7
$\epsilon(b_{112})$	"	" β_{1112}	"	S_8
$\epsilon(b_{112})$	"	" β_{1222}	"	S_8
$\epsilon(b_{122})$	"	" β_{1111}	"	S_8
$\epsilon(b_{122})$	"	" β_{1112}	"	S_8
$\epsilon(b_{122})$	"	" β_{2222}	"	S_8

Tabla 3.19

Nomenclatura de los coeficientes de sesgo según sus valores absolutos

r	n ₀	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0,05	99,64	101,50	103,27	104,91	106,49	107,93	109,30	110,57	111,93	113,10	
0,10	27,00	27,41	27,84	28,29	28,73	29,19	29,66	30,14	30,64	31,16	
0,15	13,60	13,73	13,89	14,09	14,31	14,57	14,85	15,15	15,48	15,84	
0,20	8,99	8,99	9,04	9,13	9,26	9,42	9,61	9,83	10,08	10,35	
0,25	6,97	6,88	6,85	6,87	6,93	7,03	7,15	7,31	7,50	7,72	
0,30	6,03	5,85	5,75	5,71	5,71	5,75	5,83	5,94	6,07	6,24	
0,35	5,65	5,37	5,20	5,10	5,05	5,04	5,07	5,13	5,22	5,33	
0,40	5,65	5,26	5,00	4,83	4,72	4,66	4,65	4,66	4,70	4,77	
0,45	5,99	5,43	5,06	4,80	4,63	4,52	4,46	4,43	4,43	4,45	
0,50	6,68	5,87	5,34	4,99	4,74	4,57	4,45	4,38	4,34	4,33	
0,55	7,81	6,61	5,86	5,37	5,03	4,78	4,61	4,49	4,41	4,36	
0,60	9,58	7,72	6,65	5,96	5,50	5,17	4,93	4,76	4,64	4,56	
0,65	12,34	9,32	7,75	6,80	6,18	5,75	4,44	5,22	5,05	4,94	
0,70	16,80	11,58	9,25	7,94	7,12	6,58	6,20	5,92	5,72	5,57	
0,75	24,50	14,80	11,30	9,53	8,48	7,81	7,34	7,02	6,79	6,61	
0,80	39,15	19,40	14,21	11,88	10,59	9,80	9,27	8,91	8,66	8,49	
0,85	71,76	26,36	18,96	16,06	14,58	13,72	13,20	12,86	12,64	12,51	
0,90	167,61	39,53	29,86	26,65	25,22	24,52	24,19	24,05	24,03	24,08	
0,95	699,95	93,84	84,04	82,26	82,35	83,17	84,27	85,44	86,70	87,92	

Tabla 3.20

Combinación de octógonos. Varianza media integral

r	n_0	0	2	4	6
0,95		1,467	0,038	0,024	0,019
0,90		1,476	0,150	0,096	0,079
0,85		1,458	0,311	0,209	0,174
0,80		1,426	0,484	0,346	0,294
0,75		1,381	0,643	0,486	0,424
0,70		1,323	0,764	0,611	0,547
0,65		1,252	0,841	0,707	0,648
0,60		1,167	0,874	0,767	0,719
0,55		1,069	0,867	0,787	0,754
0,50		0,959	0,825	0,771	0,751
0,45		0,840	0,754	0,722	0,713
0,40		0,713	0,662	0,645	0,645
0,35		0,583	0,555	0,549	0,554
0,30		0,454	0,441	0,441	0,449
0,25		0,332	0,327	0,330	0,338
0,20		0,222	0,220	0,224	0,231
0,15		0,129	0,129	0,132	0,136
0,10		0,059	0,059	0,061	0,063

Tabla 3.21

Combinación de octógonos. Coeficiente de sesgo S_1

r	n_0	0	2	4	6
0,95		0,528	0,014	0,009	0,007
0,90		0,502	0,051	0,033	0,027
0,85		0,490	0,104	0,070	0,059
0,80		0,478	0,163	0,116	0,099
0,75		0,462	0,215	0,163	0,142
0,70		0,442	0,255	0,204	0,163
0,65		0,418	0,281	0,236	0,217
0,60		0,390	0,292	0,256	0,240
0,55		0,357	0,290	0,263	0,252
0,50		0,321	0,276	0,258	0,251
0,45		0,281	0,252	0,241	0,238
0,40		0,238	0,221	0,216	0,216
0,35		0,195	0,185	0,184	0,185
0,30		0,152	0,147	0,148	0,150
0,25		0,111	0,109	0,110	0,113
0,20		0,074	0,074	0,075	0,077
0,15		0,043	0,043	0,044	0,046
0,10		0,020	0,020	0,021	0,021

Tabla 3.21 (continuación)

Combinación de octógonos. Coeficiente de sesgo S_2

r	n_0	0	2	4	6
0,95		2,491	1,996	2,208	2,425
0,90		2,518	2,077	2,273	2,487
0,85		2,549	2,203	2,379	2,589
0,80		2,591	2,355	2,520	2,729
0,75		2,644	2,520	2,686	2,899
0,70		2,709	2,685	2,865	3,088
0,65		2,782	2,847	3,049	3,289
0,60		2,862	3,000	3,231	3,492
0,55		2,945	3,145	3,407	3,691
0,50		3,029	3,280	3,572	3,850
0,45		3,110	3,404	3,724	4,056
0,40		3,187	3,516	3,861	4,215
0,35		3,258	3,615	3,983	4,356
0,30		3,321	3,701	4,088	4,478
0,25		3,375	3,773	4,176	4,581
0,20		3,420	3,833	4,428	4,655
0,15		3,454	3,878	4,304	4,729
0,10		3,479	3,911	4,343	4,775

Tabla 3.21 (continuación)

Combinación de octógonos. Coeficiente de sesgo S_3

r	n_0	0	2	4	6
0,95		0,480	0,266	0,305	0,339
0,90		0,475	0,211	0,281	0,323
0,85		0,448	0,161	0,247	0,299
0,80		0,407	0,101	0,209	0,273
0,75		0,354	0,057	0,178	0,251
0,70		0,290	0,036	0,159	0,238
0,65		0,217	0,040	0,158	0,239
0,60		0,137	0,065	0,175	0,254
0,55		0,054	0,107	0,207	0,284
0,50		0,030	0,161	0,251	0,325
0,45		0,111	0,220	0,303	0,374
0,40		0,188	0,282	0,358	0,426
0,35		0,259	0,341	0,413	0,479
0,30		0,321	0,397	0,465	0,530
0,25		0,376	0,446	0,512	0,576
0,20		0,420	0,487	0,552	0,615
0,15		0,455	0,520	0,583	0,646
0,10		0,480	0,543	0,606	0,669

Tabla 3.21 (continuación)

Combinación de octógonos. Coeficiente de sesgo S_4

r	n_0	0	2	4	6
0,95		0,515	0,289	0,318	0,348
0,90		0,504	0,310	0,332	0,361
0,85		0,502	0,341	0,356	0,382
0,80		0,501	0,376	0,386	0,410
0,75		0,501	0,411	0,418	0,442
0,70		0,501	0,442	0,451	0,476
0,65		0,500	0,468	0,487	0,509
0,60		0,500	0,490	0,510	0,540
0,55		0,500	0,507	0,534	0,568
0,50		0,500	0,520	0,554	0,593
0,45		0,500	0,531	0,571	0,614
0,40		0,500	0,539	0,584	0,632
0,35		0,500	0,546	0,595	0,647
0,30		0,500	0,551	0,604	0,659
0,25		0,500	0,555	0,611	0,668
0,20		0,500	0,558	0,617	0,676
0,15		0,500	0,560	0,621	0,681
0,10		0,500	0,562	0,623	0,685

Tabla 3.21 (continuación)

Combinación de octógonos. Coeficiente de sesgo S_5

r	n ₀	0	2	4	6
0,95		1,005	1,131	1,257	1,382
0,90		1,022	1,150	1,277	1,405
0,85		1,051	1,183	1,313	1,445
0,80		1,092	1,229	1,365	1,502
0,75		1,146	1,289	1,432	1,575
0,70		1,210	1,361	1,512	1,664
0,65		1,283	1,444	1,604	1,764
0,60		1,363	1,533	1,704	1,874
0,55		1,446	1,627	1,807	1,988
0,50		1,530	1,721	1,912	2,103
0,45		1,611	1,813	2,014	2,215
0,40		1,688	1,899	2,110	2,321
0,35		1,759	1,976	2,199	2,418
0,30		1,822	2,049	2,277	2,505
0,25		1,876	2,110	2,345	2,579
0,20		1,920	2,160	2,401	2,641
0,15		1,955	2,200	2,444	2,689
0,10		1,980	2,228	2,475	2,723

Tabla 3.21 (continuación)

Combinación de octógonos. Coeficiente de sesgo S_6

mos para valores de r comprendidos entre 0,50 y 0,60 (excepto para diseños sin puntos centrales, en cuyo caso el sesgo aumenta paralelamente con r). Por el contrario, - los coeficientes de sesgo S_3 , S_5 , y S_6 disminuyen al aumentar r . El comportamiento de S_4 es irregular, siendo mínimo para valores de r alrededor de 0,60. Respecto a la variación con el número de puntos centrales, se observa que en general el sesgo resulta óptimo para diseños - con dos puntos centrales.

De lo anteriormente expuesto se pueden deducir las siguientes conclusiones:

- A ser posible el diseño debe poseer como mínimo un punto central, puesto que, de lo contrario, la varianza y especialmente el sesgo aumentan de forma considerable.

- Si se desea obtener estimados con un sesgo mínimo el diseño deberá poseer dos puntos centrales y una relación de radios alrededor de 0,70.

- Si de antemano se creen despreciables los coeficientes de cuarto orden, será aconsejable un diseño con varianza mínima. La elección de r dependerá del número de puntos centrales que se realicen. Así, por ejemplo, si el diseño contiene cuatro puntos centrales, una relación de radios de 0,45 resulta óptima.

- En general no se puede deducir una regla para la construcción de tales diseños, ya que dependerá de las diversas circunstancias experimentales -- que se pueden presentar. No obstante, puede concluirse que los diseños óptimos deberán poseer una relación de radios entre 0,50 y 0,60 y un número de puntos centrales entre 2 y 4.

La figura 3.5 presenta la distribución del valor de la función $W(\rho)$, inversa de $V(\rho)$, con el radio del diseño ρ para un diseño con una relación de radios $r=0,45$ y cuatro puntos centrales. Este diseño con una varianza media integral $V_m(\rho)=4,63$, corresponde al utilizado en la parte experimental de este trabajo.

3.3.1.4.2.- Combinación de heptágonos

La tabla 3.22 muestra los valores de la varianza media integral para valores de r comprendidos entre 0,05 y 0,95, y para un número de puntos centrales que varía entre 0 y 9. Como puede observarse, la varianza media $V_m(\rho)$ disminuye en general al aumentar el número de puntos centrales, y en lo referente a la relación de radios, los valores óptimos - entendiéndose como óptimos aquellos cuya varianza media integral sea mínima - se sitúan entre 0,35 y 0,50, precisándose en este sentido valores más altos de r al aumentar n_0 . La similitud de las tablas 3.20 y 3.22, no es de extrañar, puesto que ambos diseños poseen un número de puntos semejante (14 y 16), lo que influye en los valores de λ_4 y λ_6 , los cuales son muy próximos en ambos diseños, y consecuentemente, en las distribuciones de varianza.

Los diseños de tercer orden formados por combinación de heptágonos poseen todos sus estimados - excepto los de primer orden - sesgados por los posibles coeficientes de cuarto orden en cierta extensión. La tabla 3.23 muestra los valores absolutos de los coeficientes de sesgo implicados, para relaciones de radios comprendidas entre 0,10 y 0,95, y para 0,2,4 y 6 puntos centrales. El comportamiento de los coeficientes de sesgo S_1, S_2, S_3, S_4, S_5 , y S_6 es análogo al de los mismos

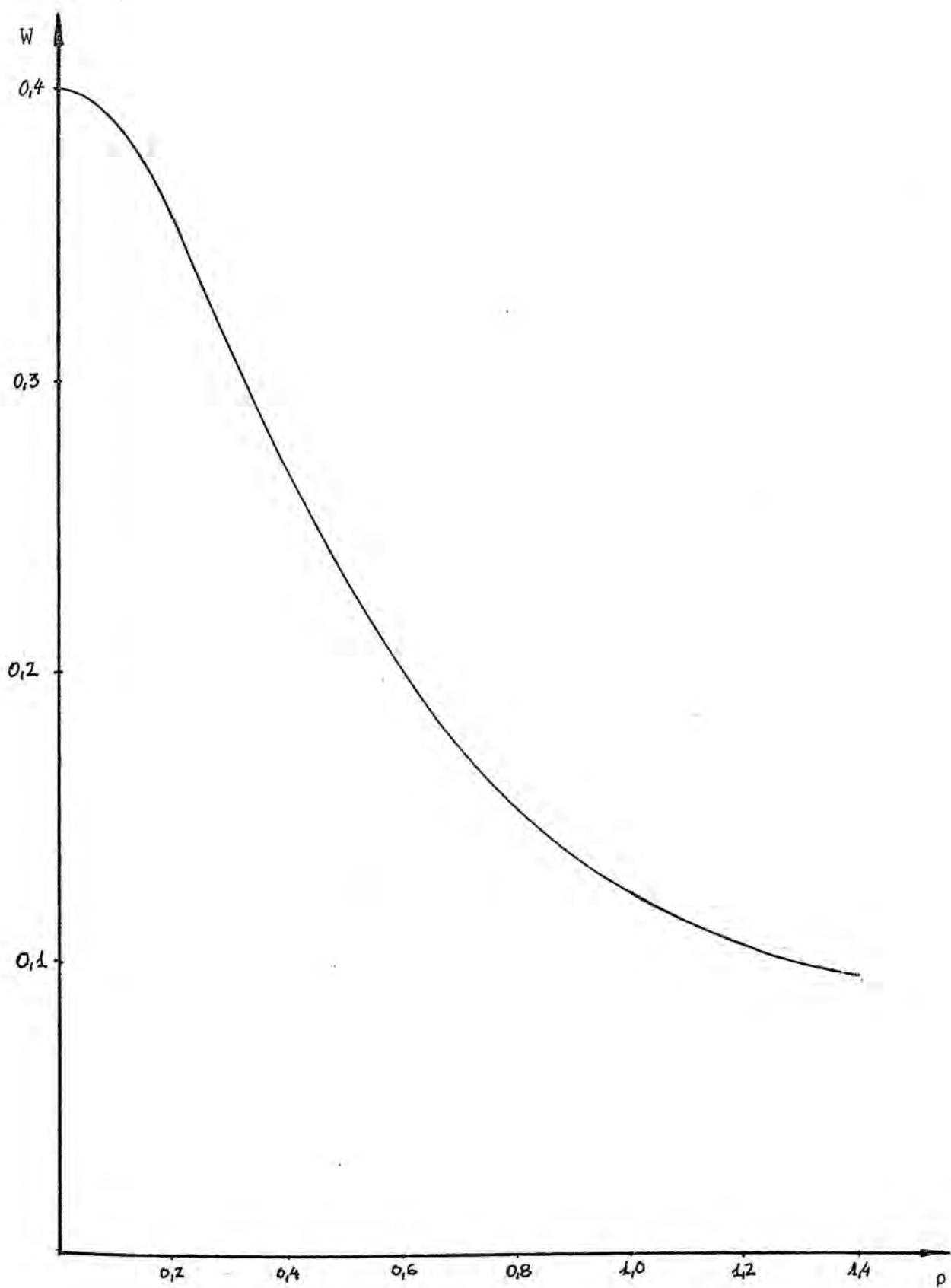


Figura 3.5

Función W para $n_0 = 4$ y $r = 0,45$

x	n_0	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0,05	99,62	101,73	103,71	105,58	107,24	108,87	110,45	111,87	113,29	114,21	
0,10	27,00	27,47	27,97	28,48	29,00	29,52	30,07	30,64	31,23	31,86	
0,15	13,60	13,75	13,95	14,18	14,46	14,76	15,11	15,48	15,89	16,35	
0,20	9,00	9,00	9,06	9,18	9,35	9,55	9,80	10,05	10,40	10,75	
0,25	6,97	6,87	6,85	6,90	6,99	7,12	7,29	7,50	7,75	8,04	
0,30	6,03	5,83	5,73	5,71	5,73	5,82	5,92	6,07	6,26	6,49	
0,35	5,65	5,34	5,17	5,07	5,04	5,06	5,12	5,22	5,35	5,52	
0,40	6,65	5,22	4,94	4,78	4,68	4,65	4,66	4,70	4,79	4,90	
0,45	5,99	5,37	4,98	4,72	4,56	4,47	4,43	4,43	4,46	4,53	
0,50	6,68	5,78	5,23	4,87	4,63	4,48	4,39	4,34	4,33	4,35	
0,55	7,81	6,48	5,70	5,21	4,88	4,65	4,50	4,41	4,36	4,34	
0,60	9,58	7,53	6,42	5,74	5,30	4,99	4,70	4,64	4,55	4,50	
0,65	12,34	9,03	7,43	6,50	5,92	5,52	5,25	5,06	4,93	4,84	
0,70	16,80	11,14	8,50	7,55	6,79	6,29	5,95	5,72	5,55	5,44	
0,75	24,50	14,10	10,68	9,02	8,06	7,46	7,05	6,78	6,59	6,46	
0,80	39,15	18,31	13,38	11,24	10,09	9,40	8,96	8,67	8,47	8,34	
0,85	71,76	24,70	17,89	15,31	14,04	13,32	12,90	12,64	12,49	12,41	
0,90	167,60	37,20	28,63	25,91	24,77	24,36	24,06	24,03	24,09	24,22	
0,95	699,95	91,16	83,17	82,15	82,77	83,93	85,31	86,70	88,08	89,40	

Tabla 3.22

Combinación de heptágonos. Varianza media integral

r	n_0	0	2	4	6
0,95		1,497	0,035	0,022	0,019
0,90		1,484	0,137	0,090	0,075
0,85		1,461	0,287	0,196	0,166
0,80		1,427	0,454	0,327	0,282
0,75		1,382	0,609	0,463	0,409
0,70		1,324	0,732	0,588	0,531
0,65		1,252	0,814	0,585	0,634
0,60		1,167	0,853	0,749	0,708
0,55		1,070	0,851	0,775	0,747
0,50		0,960	0,814	0,763	0,748
0,45		0,840	0,748	0,717	0,713
0,40		0,713	0,658	0,644	0,648
0,35		0,583	0,553	0,550	0,559
0,30		0,454	0,440	0,443	0,454
0,25		0,332	0,327	0,332	0,342
0,20		0,222	0,221	0,226	0,234
0,15		0,129	0,130	0,133	0,139
0,10		0,059	0,059	0,061	0,064

Tabla 3.23

Combinación de heptágonos. Coeficiente de sesgo S_1

r	n_0	0	2	4	6
0,95		0,500	0,012	0,007	0,006
0,90		0,495	0,046	0,030	0,025
0,85		0,487	0,096	0,066	0,055
0,80		0,476	0,156	0,109	0,094
0,75		0,461	0,203	0,155	0,136
0,70		0,442	0,244	0,196	0,177
0,65		0,418	0,272	0,229	0,212
0,60		0,390	0,285	0,250	0,236
0,55		0,357	0,284	0,259	0,249
0,50		0,320	0,272	0,255	0,250
0,45		0,280	0,249	0,239	0,238
0,40		0,238	0,220	0,215	0,216
0,35		0,195	0,185	0,183	0,186
0,30		0,152	0,147	0,148	0,151
0,25		0,111	0,109	0,111	0,114
0,20		0,074	0,074	0,075	0,078
0,15		0,043	0,043	0,045	0,046
0,10		0,020	0,020	0,020	0,021

Tabla 3.23 (continuación)

Combinación de heptágonos. Coeficiente de sego S_2

r	n_0	0	2	4	6
0,95		2,506	2,025	2,270	2,519
0,90		2,521	2,103	2,333	2,580
0,85		2,550	2,223	2,438	2,683
0,80		2,591	2,373	2,578	2,823
0,75		2,645	2,537	2,744	2,996
0,70		2,709	2,706	2,926	3,190
0,65		2,782	2,871	3,115	3,397
0,60		2,862	3,030	3,304	3,609
0,55		2,942	3,180	3,486	3,817
0,50		3,029	3,320	3,659	4,015
0,45		3,110	3,448	3,818	4,200
0,40		3,187	3,564	3,961	4,368
0,35		3,258	3,667	4,089	4,517
0,30		3,321	3,756	4,199	4,546
0,25		3,375	3,831	4,292	4,755
0,20		3,419	3,892	4,367	4,844
0,15		3,454	3,939	4,424	4,912
0,10		3,479	3,972	4,466	4,960

Tabla 3.23 (continuación)

Combinación de heptágonos. Coeficiente de sesgo S_3

r	n_0	0	2	4	6
0,95		0,532	0,568	0,603	0,636
0,90		0,538	0,575	0,610	0,642
0,85		0,548	0,585	0,621	0,654
0,80		0,561	0,599	0,636	0,670
0,75		0,577	0,617	0,554	0,689
0,70		0,595	0,635	0,674	0,710
0,65		0,613	0,655	0,695	0,732
0,60		0,631	0,675	0,715	0,754
0,55		0,649	0,693	0,735	0,775
0,50		0,665	0,711	0,754	0,795
0,45		0,680	0,727	0,771	0,813
0,40		0,694	0,742	0,787	0,829
0,35		0,706	0,755	0,801	0,844
0,30		0,717	0,767	0,813	0,857
0,25		0,727	0,777	0,824	0,869
0,20		0,735	0,785	0,833	0,879
0,15		0,741	0,792	0,840	0,886
0,10		0,746	0,797	0,845	0,891

Tabla 3.23 (continuación)

Combinación de heptágonos. Coeficiente de sesgo S_4

r	n_0	0	2	4	6
0,95		0,177	0,190	0,201	0,212
0,90		0,179	0,192	0,203	0,214
0,85		0,183	0,195	0,207	0,218
0,80		0,187	0,200	0,212	0,224
0,75		0,193	0,206	0,218	0,230
0,70		0,198	0,212	0,225	0,237
0,65		0,205	0,219	0,232	0,244
0,60		0,211	0,225	0,239	0,252
0,55		0,216	0,231	0,245	0,259
0,50		0,222	0,237	0,252	0,265
0,45		0,227	0,243	0,257	0,271
0,40		0,232	0,248	0,273	0,277
0,35		0,236	0,252	0,267	0,282
0,30		0,239	0,256	0,271	0,286
0,25		0,242	0,259	0,275	0,290
0,20		0,245	0,262	0,279	0,293
0,15		0,245	0,264	0,280	0,295
0,10		0,249	0,266	0,282	0,297

Tabla 3.23 (continuación)

Combinación de heptágonos. Coeficiente de sego S_5

r	n_0	0	2	4	6
0,95		1,005	1,149	1,293	1,436
0,90		1,022	1,168	1,314	1,460
0,85		1,051	1,201	1,351	1,501
0,80		1,092	1,248	1,404	1,560
0,75		1,146	1,309	1,473	1,637
0,70		1,210	1,383	1,556	1,728
0,65		1,283	1,466	1,650	1,833
0,60		1,363	1,557	1,752	1,947
0,55		1,445	1,552	1,859	2,066
0,50		1,530	1,748	1,967	2,185
0,45		1,611	1,841	2,072	2,302
0,40		1,688	1,929	2,171	2,412
0,35		1,759	2,010	2,261	2,513
0,30		1,822	2,082	2,342	2,602
0,25		1,876	2,144	2,412	2,680
0,20		1,920	2,195	2,469	2,743
0,15		1,955	2,235	2,514	2,793
0,10		1,980	2,263	2,246	2,829

Tabla 3.23 (continuación)

Combinación de heptágonos. Coeficiente de sesgo S_6

r	n_0	0	2	4	6
0,95		0,501	0,293	0,326	0,361
0,90		0,500	0,312	0,340	0,374
0,85		0,500	0,341	0,363	0,394
0,80		0,500	0,375	0,392	0,422
0,75		0,500	0,410	0,424	0,454
0,70		0,500	0,442	0,457	0,488
0,65		0,500	0,469	0,489	0,522
0,60		0,500	0,491	0,518	0,555
0,55		0,500	0,510	0,543	0,584
0,50		0,500	0,525	0,565	0,611
0,45		0,500	0,536	0,583	0,634
0,40		0,500	0,546	0,598	0,653
0,35		0,500	0,553	0,610	0,669
0,30		0,500	0,559	0,620	0,682
0,25		0,500	0,563	0,627	0,693
0,20		0,500	0,566	0,633	0,701
0,15		0,500	0,569	0,638	0,707
0,10		0,500	0,570	0,641	0,711

Tabla 3.23 (continuación)

Combinación de heptágonos. Coeficiente de sesgo S_7

r	n_0	0	2	4	6
0,95		0,495	0,272	0,315	0,353
0,90		0,478	0,233	0,294	0,339
0,85		0,499	0,178	0,263	0,319
0,80		0,408	0,123	0,230	0,295
0,75		0,354	0,080	0,201	0,276
0,70		0,290	0,059	0,185	0,266
0,65		0,217	0,061	0,184	0,268
0,60		0,137	0,084	0,200	0,284
0,55		0,054	0,124	0,231	0,313
0,50		0,030	0,175	0,274	0,354
0,45		0,111	0,233	0,324	0,402
0,40		0,188	0,294	0,379	0,454
0,35		0,259	0,353	0,433	0,507
0,30		0,322	0,407	0,484	0,557
0,25		0,376	0,456	0,531	0,593
0,20		0,410	0,497	0,570	0,642
0,15		0,455	0,529	0,602	0,673
0,10		0,480	0,553	0,525	0,696

Tabla 3.23 (continuación)

Combinación de heptágonos. Coeficiente de sesgo S_8

en los diseños formados por combinación de octógonos. - El comportamiento de los coeficientes de sesgo adicionales S_7 y S_8 , es análogo al de los S_3 y S_6 , aumentando -- con relaciones de radio crecientes.

Dada la similitud de las tablas señaladas en este subapartado con las señaladas en el subapartado anterior, las cuales se refieren a diseños formados por combinación de octógonos, las conclusiones que aquí se -- pueden obtener son análogas a las allí descritas.

3.3.1.4.3.- Combinación mixta de heptágonos y octógonos

Como puede observarse, no se han estudiado combinaciones mixtas de heptágonos y octógonos, ya -- que raramente pueden resultar de utilidad. No obstante, caso de utilizarse, debe señalarse que su comportamiento es similar al de las combinaciones descritas, y que en -- todo caso es preferible utilizarlas de modo que el radio del octógono sea superior al del heptágono, puesto que -- así los coeficientes de sesgo S_7 y S_8 son prácticamente despreciables para relaciones de radio intermedias.

3.3.2.- ESTIMACION DE LOS COEFICIENTES

En este apartado se pretende formular las ecuaciones necesarias para la fácil estimación y poste-- rior análisis estadístico de las ecuaciones de tercer or-- den en espacios bidimensionales.

La ecuación matricial para la estimación de los coeficientes es, como ya se indicó en la introduc

ción a este trabajo:

$$\underline{B} = (\underline{X}'\underline{X})^{-1}\underline{X}'\underline{Y} \quad (3.40)$$

es decir, el producto de la matriz de precisión por la matriz $\underline{X}'\underline{Y}$. Esta última contiene como componentes elementos de la forma $\{0y\}, \{1y\}, \{2y\}$, etc., según la nomenclatura introducida en 1.2.10.3.1. Si se efectúa este producto siguiendo la expresión generalizada para la matriz de precisión de un diseño (ecuación 3.16), y teniendo en cuenta el factor de escala c para matrices de diseño no normalizadas, se puede llegar a las ecuaciones siguientes, que indican las operaciones a realizar para la estimación de los coeficientes en función de los parámetros característicos del diseño λ_4 y λ_6 :

$$b_0 = N^{-1}A(8\lambda_4^2\{0y\} - 2\lambda_4^2c^2(\{11y\} + \{22y\})) \quad (3.41)$$

$$b_1 = N^{-1}B(36\lambda_6c\{1y\} - 6\lambda_4c^2\{111y\} - 6\lambda_4c^2\{122y\}) \quad (3.42)$$

$$b_2 = N^{-1}B(36\lambda_6c\{2y\} - 6\lambda_4c^2\{222y\} - 6\lambda_4c^2\{112y\}) \quad (3.43)$$

$$b_{11} = N^{-1}A(-2\lambda_4c\{0y\} + (3\lambda_4-1)\{11y\}c^2 + (1-\lambda_4)c^2\{22y\}) \quad (3.44)$$

$$b_{22} = N^{-1}A(-2\lambda_4c\{0y\} + (3\lambda_4-1)\{22y\}c^2 + (1-\lambda_4)c^2\{11y\}) \quad (3.45)$$

$$b_{12} = N^{-1}(c^2/\lambda_4)\{12y\} \quad (3.46)$$

$$b_{111} = N^{-1}B(-6\lambda_4 c^2\{1y\} + (3-\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})c^3\{111y\} + \\ + 3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6}-1)c^3\{122y\}) \quad (3.47)$$

$$b_{222} = N^{-1}B(-6\lambda_4 c^2\{2y\} + (3-\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})c^3\{222y\} + \\ + 3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6}-1)c^3\{112y\}) \quad (3.48)$$

$$b_{112} = N^{-1}B(-6\lambda_4 c^2\{2y\} + 3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6}-1)c^3\{222y\} + \\ + 3(5-3\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})c^3\{112y\}) \quad (3.49)$$

$$b_{122} = N^{-1}B(-6\lambda_4 c^2\{1y\} + 3(\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6}-1)c^3\{111y\} + \\ + 3(5-3\frac{\lambda_4^2}{\lambda_6})c^3\{122y\}) \quad (3.50)$$

donde A y B vienen dados por las ecuaciones 3.24 y 3.24, λ_4 y λ_6 se calculan mediante las ecuaciones 3.33 y 3.34, mientras que c se calcula de acuerdo con la ecuación 1.5.

3.3.3.- ANALISIS DE VARIANZA

En este apartado se introducen las expresiones necesarias para llevar a cabo el análisis de varianza de las ecuaciones de tercer orden estimadas en espacios bidimensionales.

Siguiendo un desarrollo análogo al efectuado en el apartado 1.2.10.3.2 para ecuaciones estimadas de segundo orden, se dividirá la suma de cuadrados total

$$S = \sum_{i=1}^N y_i^2$$

con N grados de libertad en dos partes:

i) la suma de cuadrados debida al ajuste de la ecuación de tercer orden S_{03} con 10 grados de libertad (uno por coeficiente)

ii) la suma residual de cuadrados R obtenida por diferencia entre las dos primeras, con N-10 grados de libertad:

$$R = S - S_{03} \quad (3.51)$$

La suma de cuadrados debida a la regresión puede, a su vez, dividirse en tres bloques:

a) la suma S_0 con un grado de libertad, asociada con el término de orden cero, llamada corrección debida a la media:

$$S_0 = \{0y\}^2/N \quad (3.52)$$

b) la suma S_{20} , con tres grados de libertad, asociada con los términos de segundo orden:

$$S_{20} = b_0\{0y\} + b_{11}\{11y\} + \dots$$

$$+ b_{22}\{22y\} + b_{12}\{12y\} - \{0y\}^2/N \quad (3.53)$$

c) la suma S_{130} , con seis grados de libertad, asociada con los términos de primer y tercer orden (dado que los estimados de primer y tercer orden se hallan correlacionados, no es posible la separación en dos bloques ortogonales de las sumas cuadráticas correspondientes, por lo que se deben considerar conjuntamente):

$$S_{130} = b_1\{1y\} + b_2\{2y\} + b_{111}\{111y\} + b_{222}\{222y\} \\ + b_{112}\{112y\} + b_{122}\{122y\} \quad (3.54)$$

Mediante estas sumas cuadráticas, es posible el estudio de la significación estadística, a cierto nivel de probabilidad, de los coeficientes englobados en las distintas sumas cuadráticas, si para ello se dispone de una estimación de la varianza del error. La suma residual de cuadrados R puede a su vez subdividirse en dos sumas cuadráticas:

a) la suma cuadrática S_e debida al error experimental (si existe replicación en alguno de los puntos que forman el diseño, es decir, si existe estimación interna del error), con p grados de libertad.

b) la suma cuadrática S_d correspondiente al desajuste del modelo de tercer orden, con $N-10-p$ grados de libertad, obtenida como diferencia entre R y S_e :

$$S_d = R - S_e \quad (3.55)$$

A partir de las sumas cuadráticas S_e y S_d y de sus grados de libertad, será posible el cálculo de las medias cuadráticas correspondientes, y probar consiguientemente, mediante un test de F, la validez estadística del modelo propuesto.

3.3.4.- DISCUSION DE LOS DISEÑOS PROPUESTOS

De lo anteriormente expuesto se puede concluir que la construcción y análisis de diseños de tercer orden en espacios bidimensionales, es una tarea ciertamente asequible, con un número de puntos experimentales relativamente pequeño, y que en ocasiones puede resultar de gran utilidad.

La elección del tipo de diseño de tercer orden dependerá de los objetivos que se quieran cubrir al inicio de la investigación, aunque, en general, la elección lógica debe recaer sobre el formado por la combinación de octógonos. Tanto por su menor sesgo, como por facilidad de cálculo, y especialmente por su flexibilidad en un tipo secuencial de investigación (detalle que se estudia adecuadamente en el apartado 6), los diseños octogonales combinados son superiores a los correspondientes heptagonales, aun con el inconveniente (que en muchos casos no será tal) de la realización de dos experimentos adicionales.

Los diseños formados por combinación de heptágonos son especialmente útiles en ocasiones en que el coste de los experimentos es realmente elevado, y a su vez, interesa el ajuste de una relación polinomial de orden superior al primero.

Por otra parte, fijado ya el tipo de diseño de tercer orden, la elección de la relación de radios dependerá del número de puntos centrales que se realicen y, en general, como ya se ha comentado, de la situación experimental concreta en que se sitúe el problema. En - todo caso, la elección se puede efectuar adecuadamente, mediante el uso de las tablas 3.20, 3.21, 3.22 y 3.23, y a partir de todo lo expuesto en el apartado 3.3.1.4.1.

4.- S I M U L A C I O N E X P E R I M E N T A L

S O B R E F U N C I O N E S

M U L T I V A R I A B L E S

En este apartado se describen las simulaciones efectuadas sobre diversas funciones multivariantes, para comprobar la eficacia de los diversos diseños propuestos en el apartado 3.

4.1.- SUPERFICIES DE PRIMER ORDEN

El estudio realizado en este punto tiene como objetivo comparar la eficacia de los diseños axiales frente a la de los factoriales. Para ello, se han efectuado simulaciones experimentales por medio de un computador Siemens.

Los diseños elegidos han sido el axial y el factorial fraccionado $1/2$ (para que, de esta forma, - el sesgo de los coeficientes de las interacciones fuese nulo), ambos con cinco puntos centrales para una estimación interna del error con un número razonable de grados de libertad. El espacio de las variables considerado es el de cinco dimensiones, por coincidir con el de la experimentación realizada. No obstante, los resultados son generalizables a otros espacios de diferente dimensión.

4.1.1.- PROCEDIMIENTO

El programa realizado para efectuar las simulaciones se puede esquematizar en los siguientes puntos

i) Selección de una función de cinco variables a la que se le añade un error (según la distribución normal, con una varianza determinada, y media el valor de la función en el punto considerado).

ii) Construcción de los diseños factorial y axial, de acuerdo con los incrementos de las variables y coordenadas del punto inicial (central).

iii) Cálculo de la ecuación y análisis de varianza de la misma.

iv) Cambio de variables para la obtención de la ecuación referida a las coordenadas reales, y comparación de los coeficientes con los correspondientes al desarrollo en serie de Taylor de la función considerada alrededor del punto inicial, y hasta primer grado.

Una vez seleccionada la función simuladora de un proceso real, el programa opera sucesivamente - para distintos puntos iniciales y distintos incrementos.

4.1.2.- RESULTADOS OBTENIDOS

Para tener conocimiento del rango de los incrementos para los cuales la ecuación es significativa y, por consiguiente, comparable, se han realizado unas - pruebas previas para cada una de las cinco funciones estudiadas. Estas han consistido simplemente en disminuir el valor del incremento hasta hallar dos ecuaciones significativas - las que se exponen en los apartados siguientes - para cada diseño y para cada uno de los tres puntos iniciales estudiados.

La descripción del tipo de función, así - como los resultados obtenidos con la misma, se exponen - en los cinco apartados que siguen.

4.1.2.1.- Función F-1

Como función F-1 se ha designado a la fun

ción cuya expresión matemática es:

$$y = e^{-(x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2 + 4x_4^2 + 5x_5^2)} \quad (4.1)$$

Como puede observarse, los coeficientes ligados a cada variable son distintos, y con un "peso específico" creciente dentro de la misma, para así determinar la facilidad de los diseños para su estimación. La función presenta además un gradiente decreciente a medida que los puntos se alejan del origen de coordenadas.

Los incrementos (iguales para todas las variables) y los puntos iniciales (asimismo idénticos para todas ellas) para los que las ecuaciones han demostrado ser estadísticamente significativas han sido los siguientes:

Punto inicial	1,0	Incrementos	0,006 y 0,005
"	"	1,5	" 0,005 y 0,004
"	"	2,0	" 0,0025 0,0015

Los coeficientes del desarrollo en serie de Taylor hasta primer orden, correspondientes a los distintos puntos iniciales, se muestran en las tablas siguientes (simulaciones F1-1 a F1-12), bajo la denominación de coeficientes reales. Asimismo se muestran los resultados obtenidos con los diseños, los análisis de varianza correspondientes, así como la comparación coeficiente real - coeficiente estimado en términos porcentuales.

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1- 1

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.14249E 13	15		
B 0	0.30697E 06	0.14134E 13	1	0.14134E 13	901521.810
B 1	-0.34163E 04	0.17507E 09	1	0.17507E 09	111.665
B 2	-0.73344E 04	0.80691E 09	1	0.80691E 09	514.666
B 3	-0.11017E 05	0.18207E 10	1	0.18207E 10	1161.297
B 4	-0.15019E 05	0.33837E 10	1	0.33837E 10	2158.210
B 5	-0.18723E 05	0.52581E 10	1	0.52581E 10	3353.722
RESIDUAL		0.51073E 08	9	0.56748E 07	
ERROR		0.62713E 07	4	0.15678E 07	
DESAJUSTE		0.44802E 08	5	0.89603E 07	5.715

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.03

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.95586E 07	0.94830E 07	0.80
B 1	-0.56939E 06	-0.61180E 06	6.93
B 2	-0.12224E 07	-0.12236E 07	0.10
B 3	-0.18362E 07	-0.18354E 07	0.04
B 4	-0.25032E 07	-0.24472E 07	2.29
B 5	-0.31204E 07	-0.30590E 07	2.01

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.0060

PUNTO INICIAL 1.0000

SIMULACION F1-2

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1- 2

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.19917E 13	21		
B 0	0.30681E 06	0.19767E 13	1	0.19767E 13	1115547.000
B 1	-0.31181E 04	0.20417E 09	1	0.20417E 09	115.220
B 2	-0.72730E 04	0.11105E 10	1	0.11108E 10	626.891
B 3	-0.10690E 05	0.23997E 10	1	0.23997E 10	1354.232
B 4	-0.14921E 05	0.46752E 10	1	0.46752E 10	2638.431
B 5	-0.17535E 05	0.64568E 10	1	0.64568E 10	3643.834
RESIDUAL		0.80818E 08	15	0.53879E 07	
ERROR		0.70879E 07	4	0.17720E 07	
DESAJUSTE		0.73730E 08	11	0.67028E 07	3.783

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.61

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.92295E 07	0.94830E 07	2.67
B 1	-0.51968E 06	-0.61180E 06	15.06
B 2	-0.12122E 07	-0.12236E 07	0.93
B 3	-0.17816E 07	-0.18354E 07	2.93
B 4	-0.24868E 07	-0.24472E 07	1.62
B 5	-0.29225E 07	-0.30590E 07	4.46

*** DISEÑO AXIAL ***

SIMULACION F1-3

2000 TOTAL 1.0000

INCREMENTS 0.0050

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1- 3

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.14157E 13	15		
B 0	0.30639E 06	0.14081E 13	1	0.14081E 13	543845.310
B 1	-0.25997E 04	0.10138E 09	1	0.10138E 09	39.155
B 2	-0.57584E 04	0.49739E 09	1	0.49739E 09	192.102
B 3	-0.96178E 04	0.13875E 10	1	0.13875E 10	535.885
B 4	-0.11578E 05	0.20108E 10	1	0.20108E 10	776.611
B 5	-0.15301E 05	0.35118E 10	1	0.35118E 10	1356.326
RESIDUAL		0.57576E 08	9	0.63974E 07	
ERROR		0.10357E 08	4	0.25892E 07	
DESAJUSTE		0.47219E 08	5	0.94439E 07	3.647

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 5.55

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.92774E 07	0.94830E 07	2.17
B 1	-0.51995E 06	-0.61180E 06	15.01
B 2	-0.11517E 07	-0.12236E 07	5.88
B 3	-0.19236E 07	-0.18354E 07	4.80
B 4	-0.23156E 07	-0.24472E 07	5.38
B 5	-0.30602E 07	-0.30590E 07	0.04

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.0050

PUNTO INICIAL 1.0000

SIMULACION F1-4

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1- 4

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.19900E 13	21		
B 0	0.30697E 06	0.19788E 13	1	0.19788E 13	2388566.000
B 1	-0.29339E 04	0.18077E 09	1	0.18077E 09	218.200
B 2	-0.67517E 04	0.95728E 09	1	0.95728E 09	1155.516
B 3	-0.91062E 04	0.17414E 10	1	0.17414E 10	2102.000
B 4	-0.12062E 05	0.30555E 10	1	0.30555E 10	3688.227
B 5	-0.15697E 05	0.51744E 10	1	0.51744E 10	6245.945
RESIDUAL		0.50639E 08	15	0.33759E 07	
ERROR		0.33138E 07	4	0.82844E 06	
DESAJUSTE		0.47325E 08	11	0.43023E 07	5.193

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.45

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.96172E 07	0.94830E 07	1.42
B 1	-0.58679E 06	-0.61180E 06	4.09
B 2	-0.13503E 07	-0.12236E 07	10.36
B 3	-0.18212E 07	-0.18354E 07	0.77
B 4	-0.24125E 07	-0.24472E 07	1.42
B 5	-0.31394E 07	-0.30590E 07	2.63

*** DISEÑO AXIAL ***

SIMULACION F1-5

PRINTO INITIAL 1.5000

INCREASE TO 0.0050

x	y	x ²	x ³	x ⁴	x ⁵
1.000	0.21107E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.22794E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.20124E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.23337E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.19569E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.24301E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.14714E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.25935E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.17454E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.27055E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.22042E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.21481E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.21771E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.21981E-02	1.000	0.000	0.000	0.000
1.000	0.22175E-02	1.000	0.000	0.000	0.000

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1- 5

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.74335E-04	15		
B 0	0.22125E-02	0.73427E-04	1	0.73427E-04	327063.560
B 1	-0.29153E-04	0.12749E-07	1	0.12749E-07	56.785
B 2	-0.67801E-04	0.68955E-07	1	0.68955E-07	307.142
B 3	-0.95519E-04	0.13686E-06	1	0.13686E-06	609.608
B 4	-0.13177E-03	0.26047E-06	1	0.26047E-06	1160.200
B 5	-0.16792E-03	0.42296E-06	1	0.42296E-06	1883.955
RESIDUAL		0.56156E-08	9	0.62396E-09	
ERROR		0.89802E-09	4	0.22450E-09	
DESAJUSTE		0.47176E-08	5	0.94352E-09	4.203

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.41

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.14986E 00	0.15075E 00	0.59
B 1	-0.58306E-02	-0.66021E-02	11.69
B 2	-0.13560E-01	-0.13204E-01	2.70
B 3	-0.19104E-01	-0.19806E-01	3.54
B 4	-0.26355E-01	-0.26408E-01	0.20
B 5	-0.33584E-01	-0.33011E-01	1.74

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.0050

PUNTO INICIAL	1.5000
---------------	--------

SIMULACION F1-6

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1- 6

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.10425E-03	21		
B 0	0.22145E-02	0.10298E-03	1	0.10298E-03	352611.560
B 1	-0.31468E-04	0.20795E-07	1	0.20795E-07	71.202
B 2	-0.68541E-04	0.98656E-07	1	0.98656E-07	337.792
B 3	-0.10024E-03	0.21101E-06	1	0.21101E-06	722.471
B 4	-0.13095E-03	0.36011E-06	1	0.36011E-06	1232.995
B 5	-0.16426E-03	0.56664E-06	1	0.56664E-06	1940.130
RESIDUAL		0.72990E-08	15	0.48660E-09	
ERROR		0.11682E-08	4	0.29206E-09	
DESAJUSTE		0.61308E-08	11	0.55734E-09	1.908

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 1.85

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.15085E 00	0.15075E 00	0.07
B 1	-0.62936E-02	-0.66021E-02	4.67
B 2	-0.13708E-01	-0.13204E-01	3.82
B 3	-0.20048E-01	-0.19806E-01	1.22
B 4	-0.26190E-01	-0.26408E-01	0.83
B 5	-0.32853E-01	-0.33011E-01	0.46

DISEÑO AXIAL

SIMULACION F1- 7

00051 INITIAL 1.5000

INCREASED 0.0040

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1- 7

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.73536E+04	15		
B 0	0.22057E+02	0.72976E+04	1	0.72976E+04	317749.120
B 1	-0.25452E+04	0.97172E+08	1	0.97172E+08	42.310
B 2	-0.51429E+04	0.39674E+07	1	0.39674E+07	172.746
B 3	-0.75437E+04	0.85360E+07	1	0.85360E+07	371.671
B 4	-0.10572E+03	0.16767E+06	1	0.16767E+06	730.045
B 5	-0.12984E+03	0.25289E+06	1	0.25289E+06	1101.133
RESIDUAL		0.43705E+08	9	0.48561E+09	
ERROR		0.91866E+09	4	0.22967E+09	
DESAJUSTE		0.34518E+08	5	0.69036E+09	3.006

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.47

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.14766E 00	0.15075E 00	2.05
B 1	-0.63630E+02	-0.66021E+02	3.62
B 2	-0.12857E+01	-0.13204E+01	2.63
B 3	-0.18859E+01	-0.19806E+01	4.78
B 4	-0.26431E+01	-0.26408E+01	0.09
B 5	-0.32461E+01	-0.33011E+01	1.67

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.0040

PUNTO INICIAL 1.5000

SIMULACION F1-8

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1- 8

COEFICIENTE		SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL					
B 0	0.22097E-02	0.10335E-03	21	0.10254E-03	1581640.000
B 1	-0.28801E-04	0.17419E-07	1	0.17419E-07	268.687
B 2	-0.53248E-04	0.59541E-07	1	0.59541E-07	918.408
B 3	-0.76815E-04	0.12391E-06	1	0.12391E-06	1911.279
B 4	-0.10871E-03	0.24819E-06	1	0.24819E-06	3828.354
B 5	-0.13064E-03	0.35841E-06	1	0.35841E-06	5528.434
RESIDUAL		0.39966E-08	15	0.26644E-09	
ERROR		0.25932E-09	4	0.64831E-10	
DESAJUSTE		0.37373E-08	11	0.33975E-09	5.241

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.90

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.15154E 00	0.15075E 00	0.53
B 1	-0.72002E-02	-0.66021E-02	9.06
B 2	-0.13312E-01	-0.13204E-01	0.82
B 3	-0.19204E-01	-0.19806E-01	3.04
B 4	-0.27179E-01	-0.26408E-01	2.92
B 5	-0.32660E-01	-0.33011E-01	1.06

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1- 9

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.11657E-26	15		
B 0	0.87927E-14	0.11597E-26	1	0.11597E-26	483575.180
B 1	-0.97870E-16	0.14368E-30	1	0.14368E-30	59.912
B 2	-0.16933E-15	0.43008E-30	1	0.43008E-30	179.339
B 3	-0.26374E-15	0.10434E-29	1	0.10434E-29	435.081
B 4	-0.33272E-15	0.16605E-29	1	0.16605E-29	692.427
B 5	-0.42705E-15	0.27356E-29	1	0.27356E-29	1140.714
RESIDUAL		0.21995E-31	9	0.24439E-32	
ERROR		0.95926E-32	4	0.23981E-32	
DESAJUSTE		0.12403E-31	5	0.24806E-32	1.034

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.11

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.10414E-11	0.10595E-11	1.71
B 1	-0.39148E-13	-0.35026E-13	11.77
B 2	-0.67731E-13	-0.70052E-13	3.31
B 3	-0.10550E-12	-0.10508E-12	0.40
B 4	-0.13309E-12	-0.14010E-12	5.00
B 5	-0.17082E-12	-0.17513E-12	2.46

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.0025

PUNTO INICIAL 2.0000

SIMULACION F1-10

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1-10

COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL	0.16268E-26	21		
B 0	0.87763E-14	1	0.16175E-26	3786583.000
B 1	-0.78932E-16	1	0.13084E-30	306.289
B 2	-0.18014E-15	1	0.68143E-30	1595.242
B 3	-0.27150E-15	1	0.15480E-29	3623.779
B 4	-0.35376E-15	1	0.26281E-29	6152.332
B 5	-0.44972E-15	1	0.42472E-29	9942.773
RESIDUAL	0.26084E-31	15	0.17390E-32	
ERROR	0.17087E-32	4	0.42717E-33	
DESAJUSTE	0.24376E-31	11	0.22160E-32	5.188

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.56

COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.10595E-11	1.56
B 1	-0.35026E-13	9.86
B 2	-0.70052E-13	2.86
B 3	-0.10508E-12	3.35
B 4	-0.14010E-12	1.00
B 5	-0.17513E-12	2.72

DISEÑO AXIAL

SIMULACION F1-11

PUNTO INICIAL 2.0000

INCREMENTO 0.0015

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1-11

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.11554E-26	15		
B 0	0.87679E-14	0.11531E-26	1	0.11531E-26	769277.560
B 1	-0.46150E-16	0.31947E-31	1	0.31947E-31	21.312
B 2	-0.10668E-15	0.17072E-30	1	0.17072E-30	113.888
B 3	-0.15336E-15	0.35281E-30	1	0.35281E-30	235.366
B 4	-0.20170E-15	0.61026E-30	1	0.61026E-30	407.116
B 5	-0.26885E-15	0.10842E-29	1	0.10842E-29	723.297
RESIDUAL		0.24375E-31	9	0.27083E-32	
ERROR		0.59960E-32	4	0.14990E-32	
DESAJUSTE		0.18379E-31	5	0.36758E-32	2.452

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.03

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.10444E-11	0.10595E-11	1.42
B 1	-0.30766E-13	-0.35026E-13	12.16
B 2	-0.71122E-13	-0.70052E-13	1.53
B 3	-0.10224E-12	-0.10508E-12	2.70
B 4	-0.13447E-12	-0.14010E-12	4.02
B 5	-0.17923E-12	-0.17513E-12	2.34

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.0015

PUNTO INICIAL 2.0000

SIMULACION F1-12

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F1-12

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.16194E-26	21		
B 0	0.87715E-14	0.16157E-26	1	0.16157E-26	2683318.000
B 1	-0.56704E-16	0.67522E-31	1	0.67522E-31	112.137
B 2	-0.11485E-15	0.27699E-30	1	0.27699E-30	460.011
B 3	-0.15865E-15	0.52853E-30	1	0.52853E-30	877.757
B 4	-0.22789E-15	0.10906E-29	1	0.10906E-29	1811.192
B 5	-0.27686E-15	0.16096E-29	1	0.16096E-29	2673.200
RESIDUAL		0.42071E-31	15	0.28047E-32	
ERROR		0.24086E-32	4	0.60214E-33	
DESAJUSTE		0.39662E-31	11	0.36057E-32	5.988

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 6.27

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.11220E-11	0.10595E-11	5.90
B 1	-0.37803E-13	-0.35026E-13	7.93
B 2	-0.76565E-13	-0.70052E-13	9.30
B 3	-0.10576E-12	-0.10508E-12	0.65
B 4	-0.15193E-12	-0.14010E-12	8.44
B 5	-0.18457E-12	-0.17513E-12	5.39

4.1.2.2.- Función F-2

Como función F-2 se ha designado a la función cuya expresión matemática es:

$$y = 100 / \{x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2 + 4x_4^2 + 5x_5^2\}^{1/2} \quad (4.2)$$

Los coeficientes ligados a cada variable son los mismos que en el caso de la función F-1 y que en el caso de las demás funciones estudiadas. Igualmente - el gradiente disminuye a medida que los puntos se alejan del origen de coordenadas.

Los incrementos y los puntos iniciales - en que las ecuaciones han mostrado ser estadísticamente significativas han sido los siguientes:

Punto inicial	1,0	Incrementos	0,12 y 0,10
"	"	1,5	" 0,16 y 0,14
"	"	2,0	" 0,18 y 0,16

Los coeficientes del desarrollo en serie de Taylor hasta primer orden correspondientes a los distintos puntos iniciales se muestran en las tablas siguientes (simulaciones F2-1 a F2-12), bajo la denominación de coeficientes reales. Asimismo se muestran los resultados de los diseños, las ecuaciones obtenidas, los análisis de varianza correspondientes, así como la comparación coeficiente estimado - coeficiente real, en términos porcentuales.

*** DISEÑO AXIAL ***

SIMULACION F2- 1

PUNTO INICIAL 1.0000

INCREMENTO 0.1200

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F2- 1

COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL	0.99949E 04	15		
B 0	0.25768E 02	1	0.99598E 04	891604.060
B 1	-0.18337E 00	1	0.50436E 00	45.150
B 2	-0.40524E 00	1	0.24633E 01	220.510
B 3	-0.60599E 00	1	0.55083E 01	493.102
B 4	-0.83389E 00	1	0.10431E 02	933.750
B 5	-0.10318E 01	1	0.15968E 02	1429.498
RESIDUAL	0.17184E 00	9	0.19093E-01	
ERROR	0.44683E-01	4	0.11171E-01	
DESAJUSTE	0.12715E 00	5	0.25431E-01	2.277

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.85

COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.51640E 02	0.72
B 1	-0.17213E 01	11.23
B 2	-0.34427E 01	1.91
B 3	-0.51640E 01	2.21
B 4	-0.68853E 01	0.93
B 5	-0.86066E 01	0.10

*** DISENO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.1200

PUNTO INICIAL	1.0000
---------------	--------

SIMULACION F2- 2

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F2- 2

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.13981E 05	21		
B 0	0.25755E 02	0.13930E 05	1	0.13930E 05	749990.180
B 1	-0.23327E 00	0.11427E 01	1	0.11427E 01	61.526
B 2	-0.39498E 00	0.32763E 01	1	0.32763E 01	176.398
B 3	-0.60930E 00	0.77963E 01	1	0.77963E 01	419.759
B 4	-0.85443E 00	0.15331E 02	1	0.15331E 02	825.447
B 5	-0.10453E 01	0.22944E 02	1	0.22944E 02	1235.342
RESIDUAL		0.79442E 00	15	0.52961E-01	
ERROR		0.74293E-01	4	0.18573E-01	
DESAJUSTE		0.72013E 00	11	0.65466E-01	3.525

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.02

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.51899E 02	0.51640E 02	0.50
B 1	-0.19439E 01	-0.17213E 01	12.93
B 2	-0.32915E 01	-0.34427E 01	4.39
B 3	-0.50775E 01	-0.51640E 01	1.67
B 4	-0.71203E 01	-0.68853E 01	3.41
B 5	-0.87106E 01	-0.86066E 01	1.21

DISEÑO AXIAL

INCREMENTO 0.1000 PUNTO INICIAL 1.0000 SIMULACION F2-3

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F2- 3

COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL	0.99969E 04	15		
B 0	0.25784E 02	1	0.99719E 04	218936.180
B 1	-0.18634E 00	1	0.52081E 00	11.435
B 2	-0.39027E 00	1	0.22846E 01	50.160
B 3	-0.51594E 00	1	0.39929E 01	87.667
B 4	-0.66754E 00	1	0.66841E 01	146.752
B 5	-0.86061E 00	1	0.11110E 02	243.917
RESIDUAL	0.47039E 00	9	0.52266E-01	
ERROR	0.18219E 00	4	0.45547E-01	
DESAJUSTE	0.28821E 00	5	0.57641E-01	1.266

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.24

COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.51990E 02	0.68
B 1	-0.18634E 01	8.25
B 2	-0.39027E 01	13.36
B 3	-0.51594E 01	0.09
B 4	-0.66754E 01	3.05
B 5	-0.86061E 01	0.01

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1
SIMULACION F2- 4

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.14024E 05	21		
B 0	0.25808E 02	0.13987E 05	1	0.13987E 05	1055430.000
B 1	-0.18277E 00	0.70152E 00	1	0.70152E 00	52.936
B 2	-0.36355E 00	0.27756E 01	1	0.27756E 01	209.444
B 3	-0.58086E 00	0.70853E 01	1	0.70853E 01	534.653
B 4	-0.70460E 00	0.10426E 02	1	0.10426E 02	786.717
B 5	-0.87499E 00	0.16078E 02	1	0.16078E 02	1213.227
RESIDUAL		0.55525E 00	15	0.37017E-01	
ERROR		0.53008E-01	4	0.13252E-01	
DESAJUSTE		0.50224E 00	11	0.45659E-01	3.445

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 5.11

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.52875E 02	0.51640E 02	2.39
B 1	-0.18277E 01	-0.17213E 01	6.18
B 2	-0.36355E 01	-0.34427E 01	5.60
B 3	-0.58086E 01	-0.51640E 01	12.48
B 4	-0.70460E 01	-0.68853E 01	2.33
B 5	-0.87499E 01	-0.86066E 01	1.67

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F2= 5

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.44327E 04	15		
B 0	0.17168E 02	0.44213E 04	1	0.44213E 04	1150012.000
B 1	-0.11728E 00	0.20633E 00	1	0.20633E 00	53.667
B 2	-0.23559E 00	0.83255E 00	1	0.83255E 00	216.552
B 3	-0.34686E 00	0.18047E 01	1	0.18047E 01	469.404
B 4	-0.45006E 00	0.30384E 01	1	0.30384E 01	790.293
B 5	-0.60303E 00	0.54547E 01	1	0.54547E 01	1418.792
RESIDUAL		0.54068E-01	9	0.60075E-02	
ERROR		0.15378E-01	4	0.38446E-02	
DESAJUSTE		0.38689E-01	5	0.77379E-02	2.013

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.24

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.33601E 02	0.34426E 02	2.40
B 1	-0.73301E 00	-0.76503E 00	4.19
B 2	-0.14724E 01	-0.15301E 01	3.77
B 3	-0.21679E 01	-0.22951E 01	5.54
B 4	-0.28129E 01	-0.30601E 01	8.08
B 5	-0.37689E 01	-0.38252E 01	1.47

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.1600

PUNTO INICIAL 1.5000

SIMULACION E2-6

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F2- 6

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.62211E 04	21		
B 0	0.17188E 02	0.62039E 04	1	0.62039E 04	537740.370
B 1	-0.11016E 00	0.25485E 00	1	0.25485E 00	22.090
B 2	-0.23786E 00	0.11881E 01	1	0.11881E 01	102.982
B 3	-0.38986E 00	0.31918E 01	1	0.31918E 01	276.661
B 4	-0.46178E 00	0.44780E 01	1	0.44780E 01	388.143
B 5	-0.61115E 00	0.78437E 01	1	0.78437E 01	679.874
RESIDUAL		0.27798E 00	15	0.18532E-01	
ERROR		0.46148E-01	4	0.11537E-01	
DESAJUSTE		0.23183E 00	11	0.21075E-01	1.827

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.27

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.34164E 02	0.34426E 02	0.76
B 1	-0.68851E 00	-0.76503E 00	10.00
B 2	-0.14866E 01	-0.15301E 01	2.84
B 3	-0.24366E 01	-0.22951E 01	6.17
B 4	-0.28861E 01	-0.30601E 01	5.69
B 5	-0.38197E 01	-0.38252E 01	0.14

DISEÑO AXIAL

INCREMENTO	PUNTO INICIAL	SIMULACION F2-7
0.1400	1.5000	

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1
SIMULACION F2- 7

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.44499E 04	15		
B 0	0.17205E 02	0.44403E 04	1	0.44403E 04	1710616.000
B 1	-0.11626E 00	0.20273E 00	1	0.20273E 00	78.102
B 2	-0.22965E 00	0.79111E 00	1	0.79111E 00	304.769
B 3	-0.31630E 00	0.15007E 01	1	0.15007E 01	578.124
B 4	-0.44010E 00	0.29053E 01	1	0.29053E 01	1119.247
B 5	-0.52150E 00	0.40795E 01	1	0.40795E 01	1571.606
RESIDUAL		0.67565E-01	9	0.75072E-02	
ERROR		0.10383E-01	4	0.25958E-02	
DESAJUSTE		0.57182E-01	5	0.11436E-01	4.406

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.86

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.34603E 02	0.34426E 02	0.52
B 1	-0.83041E 00	-0.76503E 00	8.55
B 2	-0.16404E 01	-0.15301E 01	7.21
B 3	-0.22593E 01	-0.22951E 01	1.56
B 4	-0.31436E 01	-0.30601E 01	2.73
B 5	-0.37250E 01	-0.38252E 01	2.62

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F2- 8

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.62209E 04	21		
B 0	0.17193E 02	0.62077E 04	1	0.62077E 04	787396.310
B 1	-0.10941E 00	0.25140E 00	1	0.25140E 00	31.888
B 2	-0.21399E 00	0.96158E 00	1	0.96158E 00	121.968
B 3	-0.32200E 00	0.21774E 01	1	0.21774E 01	276.185
B 4	-0.43451E 00	0.39647E 01	1	0.39647E 01	502.887
B 5	-0.51391E 00	0.55462E 01	1	0.55462E 01	703.482
RESIDUAL		0.23156E 00	15	0.15437E-01	
ERROR		0.31536E-01	4	0.78839E-02	
DESAJUSTE		0.20002E 00	11	0.18184E-01	2.306

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 1.40

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.34270E 02	0.34426E 02	0.45
B 1	-0.78153E 00	-0.76503E 00	2.16
B 2	-0.15285E 01	-0.15301E 01	0.11
B 3	-0.23000E 01	-0.22951E 01	0.21
B 4	-0.31036E 01	-0.30601E 01	1.42
B 5	-0.36708E 01	-0.38252E 01	4.04

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F2- 9

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.24972E 04	15		
B 0	0.12890E 02	0.24923E 04	1	0.24923E 04	326764.180
B 1	-0.76984E-01	0.88897E-01	1	0.88897E-01	11.655
B 2	-0.17568E 00	0.46297E 00	1	0.46297E 00	60.699
B 3	-0.23098E 00	0.80029E 00	1	0.80029E 00	104.925
B 4	-0.27977E 00	0.11741E 01	1	0.11741E 01	153.934
B 5	-0.38882E 00	0.22677E 01	1	0.22677E 01	297.320
RESIDUAL		0.69519E-01	9	0.77243E-02	
ERROR		0.30509E-01	4	0.76273E-02	
DESAJUSTE		0.39010E-01	5	0.78020E-02	1.023

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.20

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.25693E 02	0.25820E 02	0.49
B 1	-0.42769E 00	-0.43033E 00	0.61
B 2	-0.97602E 00	-0.86066E 00	13.40
B 3	-0.12832E 01	-0.12910E 01	0.60
B 4	-0.15543E 01	-0.17213E 01	9.70
B 5	-0.21601E 01	-0.21517E 01	0.39

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.1800		PUNTO INICIAL 2.0000					SIMULACION F2-10	
X0	X1	X2	X3	X4	X5	Y		
1.000	1.146	1.146	1.146	1.146	1.146	0.11614E 02		
1.000	1.146	1.146	1.146	-1.146	-1.146	0.13119E 02		
1.000	1.146	1.146	-1.146	1.146	-1.146	0.12918E 02		
1.000	1.146	1.146	-1.146	-1.146	1.146	0.12865E 02		
1.000	1.146	-1.146	1.146	1.146	-1.146	0.12756E 02		
1.000	1.146	-1.146	1.146	-1.146	1.146	0.12636E 02		
1.000	1.146	-1.146	-1.146	1.146	1.146	0.12399E 02		
1.000	1.146	-1.146	-1.146	-1.146	-1.146	0.14123E 02		
1.000	-1.146	1.146	1.146	1.146	-1.146	0.12682E 02		
1.000	-1.146	1.146	1.146	-1.146	1.146	0.12513E 02		
1.000	-1.146	1.146	-1.146	1.146	1.146	0.12280E 02		
1.000	-1.146	1.146	-1.146	-1.146	-1.146	0.13821E 02		
1.000	-1.146	-1.146	1.146	1.146	1.146	0.12080E 02		
1.000	-1.146	-1.146	1.146	-1.146	-1.146	0.13689E 02		
1.000	-1.146	-1.146	-1.146	1.146	-1.146	0.13501E 02		
1.000	-1.146	-1.146	-1.146	-1.146	1.146	0.13302E 02		
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.13053E 02		
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.12952E 02		
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.12917E 02		
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.12930E 02		
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.12838E 02		

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F2-10

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.35037E 04	21		
B 0	0.12904E 02	0.34969E 04	1	0.34969E 04	587400.060
B 1	-0.78469E-01	0.12931E 00	1	0.12931E 00	21.721
B 2	-0.14585E 00	0.44673E 00	1	0.44673E 00	75.042
B 3	-0.22473E 00	0.10606E 01	1	0.10606E 01	178.161
B 4	-0.31847E 00	0.21299E 01	1	0.21299E 01	357.774
B 5	-0.37757E 00	0.29937E 01	1	0.29937E 01	502.870
RESIDUAL		0.64283E-01	15	0.42856E-02	
ERROR		0.23813E-01	4	0.59531E-02	
DESAJUSTE		0.40471E-01	11	0.36792E-02	0.618

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.75

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.25627E 02	0.25820E 02	0.75
B 1	-0.43594E 00	-0.43033E 00	1.30
B 2	-0.81029E 00	-0.86066E 00	5.85
B 3	-0.12485E 01	-0.12910E 01	3.29
B 4	-0.17693E 01	-0.17213E 01	2.79
B 5	-0.20976E 01	-0.21517E 01	2.52

*** DISEÑO AXIAL ***

INCREMENTO 0.1600
PIVOTO INICIAL 2.0000
SIMULACION F2-11

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F2-11

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.25175E 04	15		
B 0	0.12944E 02	0.25131E 04	1	0.25131E 04	1698994.000
B 1	-0.60733E-01	0.55328E-01	1	0.55328E-01	37.404
B 2	-0.15860E 00	0.37730E 00	1	0.37730E 00	255.073
B 3	-0.21073E 00	0.66610E 00	1	0.66610E 00	450.318
B 4	-0.29327E 00	0.12901E 01	1	0.12901E 01	872.146
B 5	-0.36818E 00	0.20334E 01	1	0.20334E 01	1374.656
RESIDUAL		0.96607E-02	9	0.10734E-02	
ERROR		0.59167E-02	4	0.14792E-02	
DESAJUSTE		0.37440E-02	5	0.74880E-03	0.506

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 7.56

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.26588E 02	0.25820E 02	2.97
B 1	-0.37958E 00	-0.43033E 00	11.79
B 2	-0.99124E 00	-0.86066E 00	15.17
B 3	-0.13171E 01	-0.12910E 01	2.02
B 4	-0.18330E 01	-0.17213E 01	6.49
B 5	-0.23011E 01	-0.21517E 01	6.95

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F2-12

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.34883E 04	21		
B 0	0.12878E 02	0.34825E 04	1	0.34825E 04	1223528.000
B 1	-0.78727E-01	0.13016E 00	1	0.13016E 00	45.728
B 2	-0.15964E 00	0.53520E 00	1	0.53520E 00	188.032
B 3	-0.22435E 00	0.10570E 01	1	0.10570E 01	371.346
B 4	-0.26157E 00	0.14368E 01	1	0.14368E 01	504.788
B 5	-0.34497E 00	0.24991E 01	1	0.24991E 01	878.029
RESIDUAL		0.97380E-01	15	0.64920E-02	
ERROR		0.11385E-01	4	0.28463E-02	
DESAJUSTE		0.85994E-01	11	0.78177E-02	2.747

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 7.63

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.26243E 02	0.25820E 02	1.64
B 1	-0.49204E 00	-0.43033E 00	14.34
B 2	-0.99777E 00	-0.86066E 00	15.93
B 3	-0.14022E 01	-0.12910E 01	8.61
B 4	-0.16348E 01	-0.17213E 01	5.02
B 5	-0.21561E 01	-0.21517E 01	0.20

4.1.2.3.- Función F-3

Como función F-3 se ha designado a la función cuya expresión matemática es:

$$y = 100 - |x_1| - 2|x_2| - 3|x_3| - 4|x_4| - 5|x_5| \quad (4.3)$$

Se trata de una función piramidal, la cual es perfectamente lineal excepto en las "aristas de la pirámide". Esta es la razón por la cual se han elegido puntos iniciales más alejados del origen de coordenadas. Evidentemente, no ha lugar al desarrollo en serie de Taylor por ser la función lineal.

Los incrementos y puntos elegidos han sido los siguientes:

Punto inicial	2,0	Incrementos	0,65 y 0,55	
"	"	2,5	"	0,65 y 0,55
"	"	3,0	"	0,65 y 0,55

Los coeficientes del desarrollo en serie de Taylor hasta primer orden, correspondientes a los distintos puntos iniciales, se muestran en las tablas siguientes (simulaciones F3-1 a F3-12), bajo la denominación de coeficientes reales. Asimismo se muestran los resultados obtenidos con los diseños, los análisis de varianza correspondientes, así como la comparación coeficiente real - coeficiente estimado en términos porcentuales.

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F3- 1

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.73865E 05	15		
B 0	0.70002E 02	0.73505E 05	1	0.73505E 05	895300.120
B 1	-0.59216E 00	0.52598E 01	1	0.52598E 01	64.065
B 2	-0.12975E 01	0.25254E 02	1	0.25254E 02	307.596
B 3	-0.19489E 01	0.56975E 02	1	0.56975E 02	693.965
B 4	-0.26731E 01	0.10718E 03	1	0.10718E 03	1305.458
B 5	-0.33169E 01	0.16503E 03	1	0.16503E 03	2010.095
RESIDUAL		0.86409E 00	9	0.96010E-01	
ERROR		0.32840E 00	4	0.82101E-01	
DESAJUSTE		0.53569E 00	5	0.10714E 00	1.305

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.38

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.10024E 03	0.10000E 03	0.24
B 1	-0.91102E 00	-0.10000E 01	8.90
B 2	-0.19962E 01	-0.20000E 01	0.19
B 3	-0.29984E 01	-0.30000E 01	0.05
B 4	-0.41124E 01	-0.40000E 01	2.81
B 5	-0.51030E 01	-0.50000E 01	2.06

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F3- 2

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.10332E 06	21		
B 0	0.69981E 02	0.10285E 06	1	0.10285E 06	706810.430
B 1	-0.74472E 00	0.11647E 02	1	0.11647E 02	80.042
B 2	-0.12491E 01	0.32763E 02	1	0.32763E 02	225.168
B 3	-0.19493E 01	0.79792E 02	1	0.79792E 02	548.376
B 4	-0.24174E 01	0.12272E 03	1	0.12272E 03	843.410
B 5	-0.32497E 01	0.22177E 03	1	0.22177E 03	1524.099
RESIDUAL		0.23715E 01	15	0.15810E 00	
ERROR		0.58203E 00	4	0.14551E 00	
DESAJUSTE		0.17894E 01	11	0.16268E 00	1.118

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.33

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.99551E 02	0.10000E 03	0.45
B 1	-0.11457E 01	-0.10000E 01	14.57
B 2	-0.19216E 01	-0.20000E 01	3.92
B 3	-0.29989E 01	-0.30000E 01	0.04
B 4	-0.37191E 01	-0.40000E 01	7.02
B 5	-0.49995E 01	-0.50000E 01	0.01

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F3- 3

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.73998E 05	15		
B 0	0.70118E 02	0.73749E 05	1	0.73749E 05	1433149.000
B 1	-0.55566E 00	0.46315E 01	1	0.46315E 01	90.003
B 2	-0.11420E 01	0.19563E 02	1	0.19563E 02	380.163
B 3	-0.16844E 01	0.42558E 02	1	0.42558E 02	827.032
B 4	-0.22049E 01	0.72922E 02	1	0.72922E 02	1417.097
B 5	-0.26920E 01	0.10870E 03	1	0.10870E 03	2112.352
RESIDUAL		0.75041E 00	9	0.83379E-01	
ERROR		0.20584E 00	4	0.51459E-01	
DESAJUSTE		0.54458E 00	5	0.10892E 00	2.117

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 1.58

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.10022E 03	0.10000E 03	0.22
B 1	-0.10103E 01	-0.10000E 01	1.03
B 2	-0.20764E 01	-0.20000E 01	3.82
B 3	-0.30626E 01	-0.30000E 01	2.09
B 4	-0.40089E 01	-0.40000E 01	0.22
B 5	-0.48945E 01	-0.50000E 01	2.11

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F3- 4

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.10374E 06	21		
B 0	0.70164E 02	0.10338E 06	1	0.10338E 06	673813.680
B 1	-0.59973E 00	0.75531E 01	1	0.75531E 01	49.228
B 2	-0.11539E 01	0.27963E 02	1	0.27963E 02	182.253
B 3	-0.16261E 01	0.55530E 02	1	0.55530E 02	361.925
B 4	-0.21177E 01	0.94173E 02	1	0.94173E 02	613.789
B 5	-0.28435E 01	0.16979E 03	1	0.16979E 03	1106.631
RESIDUAL		0.19287E 01	15	0.12858E 00	
ERROR		0.61372E 00	4	0.15343E 00	
DESAJUSTE		0.13150E 01	11	0.11954E 00	0.779

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.84

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.10049E 03	0.10000E 03	0.49
B 1	-0.10904E 01	-0.10000E 01	9.04
B 2	-0.20981E 01	-0.20000E 01	4.90
B 3	-0.29566E 01	-0.30000E 01	1.45
B 4	-0.38503E 01	-0.40000E 01	3.74
B 5	-0.51699E 01	-0.50000E 01	3.40

DISEÑO AXIAL

INCREMENTO 0.5500

PUNTO INICIAL 2.5000

SIMULACION F3-5

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADU 1 SIMULACION F3- 5

COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL	0.58832E 05	15		
B 0	0.62448E 02	1	0.58496E 05	901341.370
B 1	-0.72808E 00	1	0.79516E 01	122.523
B 2	-0.12564E 01	1	0.23676E 02	364.822
B 3	-0.18698E 01	1	0.52442E 02	808.069
B 4	-0.25441E 01	1	0.97087E 02	1495.990
B 5	-0.32074E 01	1	0.15431E 03	2377.748
RESIDUAL	0.66660E 00	9	0.74066E-01	
ERROR	0.25959E 00	4	0.64898E-01	
DESAJUSTE	0.40700E 00	5	0.81400E-01	1.254

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.93

COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.10000E 03	0.61
B 1	-0.10000E 01	12.01
B 2	-0.20000E 01	3.36
B 3	-0.30000E 01	4.11
B 4	-0.40000E 01	2.15
B 5	-0.50000E 01	1.31

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.6500 PUNTO INICIAL 2.5000 SIMULACION F3- 6

X0	X1	X2	X3	X4	X5	Y
1.000	1.146	1.146	1.146	1.146	1.146	0.51176E 02
1.000	1.146	1.146	1.146	-1.146	-1.146	0.65571E 02
1.000	1.146	1.146	-1.146	1.146	-1.146	0.63089E 02
1.000	1.146	1.146	-1.146	-1.146	1.146	0.61794E 02
1.000	1.146	-1.146	1.146	1.146	-1.146	0.61958E 02
1.000	1.146	-1.146	1.146	-1.146	1.146	0.60306E 02
1.000	1.146	-1.146	-1.146	1.146	1.146	0.58570E 02
1.000	1.146	-1.146	-1.146	-1.146	-1.146	0.71851E 02
1.000	-1.146	1.146	1.146	1.146	-1.146	0.60234E 02
1.000	-1.146	1.146	1.146	-1.146	1.146	0.58838E 02
1.000	-1.146	1.146	-1.146	1.146	1.146	0.57204E 02
1.000	-1.146	1.146	-1.146	-1.146	-1.146	0.70535E 02
1.000	-1.146	-1.146	1.146	1.146	1.146	0.56388E 02
1.000	-1.146	-1.146	1.146	-1.146	-1.146	0.69007E 02
1.000	-1.146	-1.146	-1.146	1.146	-1.146	0.67805E 02
1.000	-1.146	-1.146	-1.146	-1.146	1.146	0.65575E 02
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.62585E 02
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.62857E 02
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.62926E 02
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.62719E 02
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.62592E 02

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F3- 6

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.82642E 05	21		
B 0	0.62551E 02	0.82166E 05	1	0.82166E 05	3478298.000
B 1	-0.61489E 00	0.79399E 01	1	0.79399E 01	336.116
B 2	-0.12559E 01	0.33122E 02	1	0.33122E 02	1402.127
B 3	-0.17973E 01	0.67838E 02	1	0.67838E 02	2871.766
B 4	-0.25669E 01	0.13837E 03	1	0.13837E 03	5857.484
B 5	-0.32841E 01	0.22650E 03	1	0.22650E 03	9588.176
RESIDUAL		0.16086E 01	15	0.10724E 00	
ERROR		0.94490E-01	4	0.23623E-01	
DESAJUSTE		0.15141E 01	11	0.13764E 00	5.827

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.30

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.99164E 02	0.10000E 03	0.84
B 1	-0.94599E 00	-0.10000E 01	5.40
B 2	-0.19321E 01	-0.20000E 01	3.39
B 3	-0.27651E 01	-0.30000E 01	7.83
B 4	-0.39491E 01	-0.40000E 01	1.27
B 5	-0.50525E 01	-0.50000E 01	1.05

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F3 7

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.58913E 05	15		
B 0	0.62539E 02	0.58667E 05	1	0.58667E 05	1367132.000
B 1	-0.51216E 00	0.39347E 01	1	0.39347E 01	91.692
B 2	-0.10545E 01	0.16679E 02	1	0.16679E 02	388.688
B 3	-0.16399E 01	0.40339E 02	1	0.40339E 02	940.029
B 4	-0.21943E 01	0.72222E 02	1	0.72222E 02	1683.013
B 5	-0.27358E 01	0.11227E 03	1	0.11227E 03	2616.246
RESIDUAL		0.11111E 01	9	0.12349E 00	
ERROR		0.17165E 00	4	0.42912E-01	
DESAJUSTE		0.93974E 00	5	0.18795E 00	4.380

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.15

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.99523E 02	0.10000E 03	0.48
B 1	-0.93121E 00	-0.10000E 01	6.88
B 2	-0.19173E 01	-0.20000E 01	4.14
B 3	-0.29816E 01	-0.30000E 01	0.61
B 4	-0.39896E 01	-0.40000E 01	0.26
B 5	-0.49742E 01	-0.50000E 01	0.52

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F3- 8

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.82075E 05	21		
B 0	0.62380E 02	0.81718E 05	1	0.81718E 05	964046.870
B 1	-0.53920E 00	0.61055E 01	1	0.61055E 01	72.028
B 2	-0.11855E 01	0.29511E 02	1	0.29511E 02	348.152
B 3	-0.17043E 01	0.60997E 02	1	0.60997E 02	719.605
B 4	-0.22171E 01	0.10322E 03	1	0.10322E 03	1217.776
B 5	-0.27263E 01	0.15609E 03	1	0.15609E 03	1841.396
RESIDUAL		0.11369E 01	15	0.75794E-01	
ERROR		0.33906E 00	4	0.84765E-01	
DESAJUSTE		0.79786E 00	11	0.72532E-01	0.856

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.52

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.10044E 03	0.10000E 03	0.44
B 1	-0.98036E 00	-0.10000E 01	1.96
B 2	-0.21554E 01	-0.20000E 01	7.77
B 3	-0.30987E 01	-0.30000E 01	3.29
B 4	-0.40311E 01	-0.40000E 01	0.78
B 5	-0.49569E 01	-0.50000E 01	0.86

DISEÑO AXIAL

INCREMENTO 0.0500
PUNTO INICIAL 3.0000
SIMULACION F3-9

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F3-9

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.45711E 05	15		
B 0	0.55006E 02	0.45385E 05	1	0.45385E 05	1509081.000
B 1	-0.59477E 00	0.53062E 01	1	0.53062E 01	176.434
B 2	-0.13292E 01	0.26501E 02	1	0.26501E 02	881.164
B 3	-0.18409E 01	0.50834E 02	1	0.50834E 02	1690.237
B 4	-0.24284E 01	0.88456E 02	1	0.88456E 02	2941.192
B 5	-0.31983E 01	0.15344E 03	1	0.15344E 03	5101.875
RESIDUAL		0.51918E 00	9	0.57687E-01	
ERROR		0.12030E 00	4	0.30075E-01	
DESAJUSTE		0.39888E 00	5	0.79776E-01	2.653

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.36

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.98352E 02	0.10000E 03	1.65
B 1	-0.91503E 00	-0.10000E 01	8.50
B 2	-0.20449E 01	-0.20000E 01	2.24
B 3	-0.28322E 01	-0.30000E 01	5.59
B 4	-0.37360E 01	-0.40000E 01	6.60
B 5	-0.49205E 01	-0.50000E 01	1.59

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.6500

PUNTO INICIAL 3.0000

SIMULACION F3-10

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1
SIMULACION F3-10

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.64075E 05	21		
B 0	0.55018E 02	0.63566E 05	1	0.63566E 05	1551414.000
B 1	-0.59626E 00	0.74662E 01	1	0.74662E 01	182.222
B 2	-0.13274E 01	0.37002E 02	1	0.37002E 02	903.074
B 3	-0.19712E 01	0.81600E 02	1	0.81600E 02	1991.569
B 4	-0.26044E 01	0.14245E 03	1	0.14245E 03	3476.600
B 5	-0.33716E 01	0.23872E 03	1	0.23872E 03	5826.371
RESIDUAL		0.17236E 01	15	0.11491E 00	
ERROR		0.16389E 00	4	0.40973E-01	
DESAJUSTE		0.15597E 01	11	0.14179E 00	3.461

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.66

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.10058E 03	0.10000E 03	0.58
B 1	-0.91733E 00	-0.10000E 01	8.27
B 2	-0.20421E 01	-0.20000E 01	2.11
B 3	-0.30326E 01	-0.30000E 01	1.09
B 4	-0.40068E 01	-0.40000E 01	0.17
B 5	-0.51871E 01	-0.50000E 01	3.74

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F3-11

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.45585E 05	15		
B 0	0.54973E 02	0.45330E 05	1	0.45330E 05	218773.310
B 1	-0.62530E 00	0.58651E 01	1	0.58651E 01	28.306
B 2	-0.10249E 01	0.15757E 02	1	0.15757E 02	76.047
B 3	-0.17201E 01	0.44382E 02	1	0.44382E 02	214.200
B 4	-0.22068E 01	0.73053E 02	1	0.73053E 02	352.569
B 5	-0.27601E 01	0.11427E 03	1	0.11427E 03	551.487
RESIDUAL		0.14205E 01	9	0.15783E 00	
ERROR		0.82880E 00	4	0.20720E 00	
DESAJUSTE		0.59167E 00	5	0.11833E 00	0.571

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.32

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.10045E 03	0.10000E 03	0.45
B 1	-0.11369E 01	-0.10000E 01	13.69
B 2	-0.18635E 01	-0.20000E 01	6.83
B 3	-0.31275E 01	-0.30000E 01	4.25
B 4	-0.40124E 01	-0.40000E 01	0.31
B 5	-0.50183E 01	-0.50000E 01	0.37

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.5500

PUNTO INICIAL 3.0000

SIMULACION F3-12

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F3-12

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.63949E 05	21		
B 0	0.55035E 02	0.63605E 05	1	0.63605E 05	478134.250
B 1	-0.53553E 00	0.60227E 01	1	0.60227E 01	45.274
B 2	-0.11261E 01	0.26630E 02	1	0.26630E 02	200.182
B 3	-0.17411E 01	0.63659E 02	1	0.63659E 02	478.540
B 4	-0.22281E 01	0.10425E 03	1	0.10425E 03	783.684
B 5	-0.26025E 01	0.14224E 03	1	0.14224E 03	1069.232
RESIDUAL		0.14704E 01	15	0.98028E-01	
ERROR		0.53211E 00	4	0.13303E 00	
DESAJUSTE		0.93830E 00	11	0.85300E-01	0.641

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.87

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	0.99944E 02	0.10000E 03	0.06
B 1	-0.97370E 00	-0.10000E 01	2.63
B 2	-0.20474E 01	-0.20000E 01	2.37
B 3	-0.31656E 01	-0.30000E 01	5.52
B 4	-0.40511E 01	-0.40000E 01	1.28
B 5	-0.47319E 01	-0.50000E 01	5.36

4.1.2.4.- Función F-4

Como función F-4 se ha designado a la fun
ción cuya expresión matemática es:

$$y = x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2 + 4x_4^2 \quad (4.4)$$

y, en la cual, el coeficiente ligado a x_5 es nulo. Por
consiguiente deberá ser no significativo en las ecuacio
nes estimadas.

Los incrementos y los puntos iniciales en
que las distintas ecuaciones han demostrado ser estadís-
ticamente significativas, han sido los siguientes:

Punto inicial	1,0	Incrementos	0,08 y 0,05
" "	1,5	"	0,08 y 0,05
" "	2,0	"	0,09 y 0,06

Los coeficientes del desarrollo en serie
de Taylor hasta primer orden, correspondientes a los dis-
tintos puntos iniciales, se muestran en las tablas si-
guientes (simulaciones F4-1 a F4-12), bajo la denomina-
ción de coeficientes reales. Asimismo se muestran los -
resultados obtenidos con los diseños, los análisis de va-
rianza, así como la comparación coeficiente real - coefi-
ciente estimado en términos porcentuales.

DISEÑO AXIAL

INCREMENTO 0.0500
PUNTO INICIAL 1.0000
SIMULACION F4-1

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4- 1

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.15303E 04	15		
B 0	0.10063E 02	0.15189E 04	1	0.15189E 04	906568.560
B 1	0.16792E 00	0.42298E 00	1	0.42298E 00	252.453
B 2	0.32109E 00	0.15465E 01	1	0.15465E 01	922.994
B 3	0.48041E 00	0.34619E 01	1	0.34619E 01	2066.209
B 4	0.62567E 00	0.58719E 01	1	0.58719E 01	3504.557
B 5	-0.78328E-02	0.92030E-03	1	0.92030E-03	0.549
RESIDUAL		0.65000E-01	9	0.72222E-02	
ERROR		0.67020E-02	4	0.16755E-02	
DESAJUSTE		0.58298E-01	5	0.11660E-01	6.959

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 1.97

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.97778E 01	-0.10000E 02	2.22
B 1	0.20991E 01	0.20000E 01	4.95
B 2	0.40136E 01	0.40000E 01	0.34
B 3	0.60051E 01	0.60000E 01	0.09
B 4	0.78208E 01	0.80000E 01	2.24
B 5	-0.97911E-01	0.00000E 00	0.00

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4- 2

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.21511E 04	21		
B 0	0.10083E 02	0.21348E 04	1	0.21348E 04	1257129.000
B 1	0.17610E 00	0.65122E 00	1	0.65122E 00	383.486
B 2	0.30650E 00	0.19728E 01	1	0.19728E 01	1161.728
B 3	0.49109E 00	0.50645E 01	1	0.50645E 01	2982.349
B 4	0.63631E 00	0.85027E 01	1	0.85027E 01	5006.977
B 5	-0.71642E-02	0.10778E-02	1	0.10778E-02	0.635
RESIDUAL		0.59881E-01	15	0.39921E-02	
ERROR		0.67927E-02	4	0.16982E-02	
DESAJUSTE		0.53088E-01	11	0.48262E-02	2.842

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.53

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.99529E 01	-0.10000E 02	0.47
B 1	0.22012E 01	0.20000E 01	10.06
B 2	0.38313E 01	0.40000E 01	4.22
B 3	0.61386E 01	0.60000E 01	2.31
B 4	0.79539E 01	0.80000E 01	0.58
B 5	-0.89553E-01	0.00000E 00	0.00

*** DISEÑO AXIAL ***

INCREASING 0.0500

PUNTO INICIAL 1.0000

SIMULACION F4- 3

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4- 3

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.15150E 04	15		
B 0	0.10034E 02	0.15102E 04	1	0.15102E 04	209428.310
B 1	0.10127E 00	0.15385E 00	1	0.15385E 00	21.335
B 2	0.18057E 00	0.48910E 00	1	0.48910E 00	67.826
B 3	0.29945E 00	0.13451E 01	1	0.13451E 01	186.528
B 4	0.42600E 00	0.27221E 01	1	0.27221E 01	377.491
B 5	-0.28420E-01	0.12115E-01	1	0.12115E-01	1.680
RESIDUAL		0.45785E-01	9	0.50872E-02	
ERROR		0.28844E-01	4	0.72111E-02	
DESAJUSTE		0.16941E-01	5	0.33881E-02	0.470

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.45

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.95437E 01	-0.10000E 02	4.56
B 1	0.20255E 01	0.20000E 01	1.27
B 2	0.36115E 01	0.40000E 01	9.71
B 3	0.59891E 01	0.60000E 01	0.18
B 4	0.85200E 01	0.80000E 01	6.50
B 5	-0.56840E 00	0.00000E 00	0.00

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4= 4

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.21245E 04	21		
B 0	0.10043E 02	0.21180E 04	1	0.21180E 04	643283.060
B 1	0.97002E-01	0.19760E 00	1	0.19760E 00	60.016
B 2	0.17987E 00	0.67942E 00	1	0.67942E 00	206.358
B 3	0.30903E 00	0.20055E 01	1	0.20055E 01	609.109
B 4	0.41514E 00	0.36192E 01	1	0.36192E 01	1099.251
B 5	0.13209E-01	0.36640E-02	1	0.36640E-02	1.113
RESIDUAL					
ERROR		0.54464E-01	15	0.36310E-02	
DESAJUSTE		0.13170E-01	4	0.32924E-02	
		0.41295E-01	11	0.37541E-02	1.140

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.46

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.10242E 02	-0.10000E 02	2.42
B 1	0.19400E 01	0.20000E 01	3.00
B 2	0.35974E 01	0.40000E 01	10.06
B 3	0.61806E 01	0.60000E 01	3.01
B 4	0.83029E 01	0.80000E 01	3.79
B 5	0.26418E 00	0.00000E 00	0.00

*** DISEÑO AXIAL ***

INCREMENTO 0.0500 PUNTO INICIAL 1.5000 SIMULACION F4- 5

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4- 5

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.76486E 04	15		
B 0	0.22543E 02	0.76225E 04	1	0.76225E 04	1343545.000
B 1	0.22698E 00	0.77278E 00	1	0.77278E 00	136.210
B 2	0.52173E 00	0.40830E 01	1	0.40830E 01	719.674
B 3	0.70437E 00	0.74420E 01	1	0.74420E 01	1311.717
B 4	0.95339E 00	0.13634E 02	1	0.13634E 02	2403.194
B 5	-0.20005E-01	0.60032E-02	1	0.60032E-02	1.058
RESIDUAL		0.13599E 00	9	0.15110E-01	
ERROR		0.22694E-01	4	0.56735E-02	
DESAJUSTE		0.11330E 00	5	0.22660E-01	3.994

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.66

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.22204E 02	-0.22500E 02	1.32
B 1	0.28372E 01	0.30000E 01	5.43
B 2	0.65216E 01	0.60000E 01	8.69
B 3	0.88046E 01	0.90000E 01	2.17
B 4	0.11917E 02	0.12000E 02	0.69
B 5	-0.25007E 00	0.00000E 00	0.00

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4= 6

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.10778E 05	21		
B 0	0.22617E 02	0.10742E 05	1	0.10742E 05	862741.000
B 1	0.22172E 00	0.10323E 01	1	0.10323E 01	82.912
B 2	0.45899E 00	0.44241E 01	1	0.44241E 01	355.319
B 3	0.73233E 00	0.11262E 02	1	0.11262E 02	904.523
B 4	0.94934E 00	0.18926E 02	1	0.18926E 02	1520.028
B 5	-0.27254E-01	0.15599E-01	1	0.15599E-01	1.253
RESIDUAL		0.26149E 00	15	0.17432E-01	
ERROR		0.49804E-01	4	0.12451E-01	
DESAJUSTE		0.21168E 00	11	0.19244E-01	1.546

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.15

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.21167E 02	-0.22500E 02	5.93
B 1	0.27715E 01	0.30000E 01	7.62
B 2	0.57374E 01	0.60000E 01	4.38
B 3	0.91541E 01	0.90000E 01	1.71
B 4	0.11867E 02	0.12000E 02	1.11
B 5	-0.34068E 00	0.00000E 00	0.00

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4= 7

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.76555E 04	15		
B 0	0.22577E 02	0.76459E 04	1	0.76459E 04	714935.620
B 1	0.17414E 00	0.45487E 00	1	0.45487E 00	42.533
B 2	0.32149E 00	0.15504E 01	1	0.15504E 01	144.969
B 3	0.41524E 00	0.25863E 01	1	0.25863E 01	241.838
B 4	0.57701E 00	0.49941E 01	1	0.49941E 01	466.982
B 5	0.12339E-02	0.22839E-04	1	0.22839E-04	0.002
RESIDUAL		0.10178E 00	9	0.11309E-01	
ERROR		0.42778E-01	4	0.10694E-01	
DESAJUSTE		0.59005E-01	5	0.11801E-01	1.103

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 7.32

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.22096E 02	-0.22500E 02	1.79
B 1	0.34828E 01	0.30000E 01	16.09
B 2	0.64299E 01	0.60000E 01	7.16
B 3	0.83048E 01	0.90000E 01	7.72
B 4	0.11540E 02	0.12000E 02	3.83
B 5	0.24679E-01	0.00000E 00	0.00

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4- 8

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.10654E 05	21		
B 0	0.22509E 02	0.10639E 05	1	0.10639E 05	1030692.800
B 1	0.15951E 00	0.53428E 00	1	0.53428E 00	51.759
B 2	0.31542E 00	0.20892E 01	1	0.20892E 01	202.398
B 3	0.46024E 00	0.44482E 01	1	0.44482E 01	430.926
B 4	0.60996E 00	0.78131E 01	1	0.78131E 01	756.902
B 5	0.12677E-01	0.33749E-02	1	0.33749E-02	0.327
RESIDUAL		0.20552E 00	15	0.13701E-01	
ERROR		0.41290E-01	4	0.10322E-01	
DESAJUSTE		0.16423E 00	11	0.14930E-01	1.446

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.62

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.24226E 02	-0.22500E 02	7.67
B 1	0.31901E 01	0.30000E 01	6.34
B 2	0.63084E 01	0.60000E 01	5.14
B 3	0.92048E 01	0.90000E 01	2.28
B 4	0.12199E 02	0.12000E 02	1.66
B 5	0.25354E 00	0.00000E 00	0.00

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4- 9

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.24319E 05	15		
B 0	0.40214E 02	0.24258E 05	1	0.24258E 05	1459346.000
B 1	0.37404E 00	0.20985E 01	1	0.20985E 01	126.246
B 2	0.76758E 00	0.88377E 01	1	0.88377E 01	531.671
B 3	0.10698E 01	0.17168E 02	1	0.17168E 02	1032.835
B 4	0.14725E 01	0.32524E 02	1	0.32524E 02	1956.638
B 5	-0.25337E-01	0.96292E-02	1	0.96292E-02	0.579
RESIDUAL		0.36920E 00	9	0.41022E-01	
ERROR		0.66490E-01	4	0.16623E-01	
DESAJUSTE		0.30271E 00	5	0.60542E-01	3.642

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.29

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.41089E 02	-0.40000E 02	2.72
B 1	0.41560E 01	0.40000E 01	3.90
B 2	0.85287E 01	0.80000E 01	6.61
B 3	0.11887E 02	0.12000E 02	0.94
B 4	0.16361E 02	0.16000E 02	2.26
B 5	-0.28152E 00	0.00000E 00	0.00

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.0900

PUNTO INICIAL 2.0000

SIMULACION F4-10

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4-10

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.33997E 05	21		
B 0	0.40183E 02	0.33909E 05	1	0.33909E 05	677624.620
B 1	0.43711E 00	0.40123E 01	1	0.40123E 01	80.181
B 2	0.70739E 00	0.10508E 02	1	0.10508E 02	209.998
B 3	0.11180E 01	0.26247E 02	1	0.26247E 02	524.506
B 4	0.14840E 01	0.46250E 02	1	0.46250E 02	924.251
B 5	0.28432E-02	0.16976E-03	1	0.16976E-03	0.003
RESIDUAL		0.79065E 00	15	0.52710E-01	
ERROR		0.20016E 00	4	0.50041E-01	
DESAJUSTE		0.59048E 00	11	0.53680E-01	1.073

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 7.52

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.43136E 02	-0.40000E 02	7.84
B 1	0.48568E 01	0.40000E 01	21.42
B 2	0.78599E 01	0.80000E 01	1.75
B 3	0.12422E 02	0.12000E 02	3.52
B 4	0.16489E 02	0.16000E 02	3.06
B 5	0.31591E-01	0.00000E 00	0.00

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4-11

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.24070E 05	15		
B 0	0.40037E 02	0.24044E 05	1	0.24044E 05	605348.680
B 1	0.23677E 00	0.84092E 00	1	0.84092E 00	21.171
B 2	0.50807E 00	0.38720E 01	1	0.38720E 01	97.485
B 3	0.68415E 00	0.70209E 01	1	0.70209E 01	176.762
B 4	0.94516E 00	0.13400E 02	1	0.13400E 02	337.363
B 5	-0.65470E-01	0.64296E-01	1	0.64296E-01	1.619
RESIDUAL		0.42696E 00	9	0.47440E-01	
ERROR		0.15888E 00	4	0.39719E-01	
DESAJUSTE		0.26808E 00	5	0.53617E-01	1.350

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.28

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.36919E 02	-0.40000E 02	7.70
B 1	0.39462E 01	0.40000E 01	1.34
B 2	0.84679E 01	0.80000E 01	5.85
B 3	0.11403E 02	0.12000E 02	4.98
B 4	0.15753E 02	0.16000E 02	1.55
B 5	-0.10912E 01	0.00000E 00	0.00

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.0600

PUNTO INICIAL 2.0000

SIMULACION F4-12

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F4-12

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.33820E 05	21		
B 0	0.40108E 02	0.33781E 05	1	0.33781E 05	1396959.000
B 1	0.26823E 00	0.15109E 01	1	0.15109E 01	62.480
B 2	0.48044E 00	0.48473E 01	1	0.48473E 01	200.448
B 3	0.71612E 00	0.10769E 02	1	0.10769E 02	445.345
B 4	0.98887E 00	0.20535E 02	1	0.20535E 02	849.184
B 5	-0.70625E-01	0.10475E 00	1	0.10475E 00	4.332
RESIDUAL		0.70128E 00	15	0.46752E-01	
ERROR		0.96729E-01	4	0.24182E-01	
DESAJUSTE		0.60456E 00	11	0.54960E-01	2.273

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.42

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.39327E 02	-0.40000E 02	1.68
B 1	0.44705E 01	0.40000E 01	11.76
B 2	0.80073E 01	0.80000E 01	0.09
B 3	0.11935E 02	0.12000E 02	0.54
B 4	0.16481E 02	0.16000E 02	3.01
B 5	-0.11771E 01	0.00000E 00	0.00

4.1.2.5.- Función F-5

Como función F-5 se ha designado a la función cuya expresión matemática es:

$$y = x_1^2 + 2x_2^2 + 3x_3^2 + 4x_4^2 + 5x_5 \quad (4.5)$$

la cual es análoga a la función F-4, pero con la respuesta dependiendo linealmente de la variable x_5 en esta ocasión.

Los incrementos y los puntos iniciales en que las distintas ecuaciones han demostrado ser estadísticamente significativas han sido los siguientes:

Punto inicial	1,0	Incrementos	0,11 y 0,09
"	"	1,5	"
"	"	2,0	"

Los coeficientes del desarrollo en serie de Taylor hasta primer orden, correspondientes a los distintos puntos iniciales, se muestran en las tablas siguientes (simulaciones F5-1 a F5-12), bajo la denominación de coeficientes reales. Asimismo se muestran los resultados obtenidos con los diseños, los análisis de varianza correspondientes, así como la comparación coeficiente real - coeficiente estimado en términos porcentuales.

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F5- 1

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.34571E 04	15		
B 0	0.15121E 02	0.34297E 04	1	0.34297E 04	223989.750
B 1	0.23503E 00	0.82859E 00	1	0.82859E 00	54.114
B 2	0.47383E 00	0.33678E 01	1	0.33678E 01	219.942
B 3	0.64024E 00	0.61486E 01	1	0.61486E 01	401.554
B 4	0.89897E 00	0.12122E 02	1	0.12122E 02	791.682
B 5	0.54979E 00	0.45340E 01	1	0.45340E 01	296.105
RESIDUAL		0.36555E 00	9	0.40617E-01	
ERROR		0.61248E-01	4	0.15312E-01	
DESAJUSTE		0.30430E 00	5	0.60861E-01	3.975

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.81

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.10314E 02	-0.10000E 02	3.14
B 1	0.21366E 01	0.20000E 01	6.83
B 2	0.43076E 01	0.40000E 01	7.69
B 3	0.58204E 01	0.60000E 01	2.99
B 4	0.81725E 01	0.80000E 01	2.16
B 5	0.49980E 01	0.50000E 01	0.04

*** DISENG FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.1100

PUNTO INICIAL 1.0000

SIMULACION F5-2

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F5- 2

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.48446E 04	21		
B 0	0.15131E 02	0.48081E 04	1	0.48081E 04	574837.620
B 1	0.22679E 00	0.10801E 01	1	0.10801E 01	129.135
B 2	0.43908E 00	0.40486E 01	1	0.40486E 01	484.038
B 3	0.66800E 00	0.93707E 01	1	0.93707E 01	1120.326
B 4	0.87185E 00	0.15962E 02	1	0.15962E 02	1908.401
B 5	0.52672E 00	0.58262E 01	1	0.58262E 01	696.554
RESIDUAL		0.21966E 00	15	0.14644E-01	
ERROR		0.33457E-01	4	0.83643E-02	
DESAJUSTE		0.18621E 00	11	0.16928E-01	2.024

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.10

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.97091E 01	-0.10000E 02	2.91
B 1	0.20617E 01	0.20000E 01	3.09
B 2	0.39917E 01	0.40000E 01	0.21
B 3	0.60728E 01	0.60000E 01	1.21
B 4	0.79259E 01	0.80000E 01	0.93
B 5	0.47884E 01	0.50000E 01	4.23

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F5- 3

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.34474E 04	15		
B 0	0.15120E 02	0.34291E 04	1	0.34291E 04	964209.810
B 1	0.19274E 00	0.55724E 00	1	0.55724E 00	156.684
B 2	0.36836E 00	0.20353E 01	1	0.20353E 01	572.300
B 3	0.55486E 00	0.46180E 01	1	0.46180E 01	1298.500
B 4	0.73886E 00	0.81888E 01	1	0.81888E 01	2302.533
B 5	0.43170E 00	0.27954E 01	1	0.27954E 01	786.022
RESIDUAL		0.10525E 00	9	0.11695E-01	
ERROR		0.14226E-01	4	0.35564E-02	
DESAJUSTE		0.91027E-01	5	0.18205E-01	5.119

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.62

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.10286E 02	-0.10000E 02	2.86
B 1	0.21416E 01	0.20000E 01	7.08
B 2	0.40929E 01	0.40000E 01	2.32
B 3	0.61651E 01	0.60000E 01	2.75
B 4	0.82096E 01	0.80000E 01	2.62
B 5	0.47966E 01	0.50000E 01	4.07

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.0900

PUNTO INICIAL 1.0000

SIMULACION F5-4

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F5- 4

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.48258E 04	21		
B 0	0.15118E 02	0.47998E 04	1	0.47998E 04	419114.870
B 1	0.16682E 00	0.58443E 00	1	0.58443E 00	51.032
B 2	0.36784E 00	0.28415E 01	1	0.28415E 01	248.117
B 3	0.56951E 00	0.68112E 01	1	0.68112E 01	594.748
B 4	0.72044E 00	0.10900E 02	1	0.10900E 02	951.758
B 5	0.47290E 00	0.46962E 01	1	0.46962E 01	410.074
RESIDUAL		0.22167E 00	15	0.14778E-01	
ERROR		0.45809E-01	4	0.11452E-01	
DESAJUSTE		0.17586E 00	11	0.15987E-01	1.396

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.04

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.10410E 02	-0.10000E 02	4.10
B 1	0.18536E 01	0.20000E 01	7.32
B 2	0.40872E 01	0.40000E 01	2.18
B 3	0.63279E 01	0.60000E 01	5.46
B 4	0.80049E 01	0.80000E 01	0.06
B 5	0.52544E 01	0.50000E 01	5.09

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F5- 5

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.13705E 05	15		
B 0	0.30155E 02	0.13640E 05	1	0.13640E 05	969137.620
B 1	0.35112E 00	0.18493E 01	1	0.18493E 01	131.392
B 2	0.68600E 00	0.70590E 01	1	0.70590E 01	501.538
B 3	0.10786E 01	0.17450E 02	1	0.17450E 02	1239.844
B 4	0.14646E 01	0.32177E 02	1	0.32177E 02	2286.150
B 5	0.60343E 00	0.54618E 01	1	0.54618E 01	358.063
RESIDUAL		0.53011E 00	9	0.58902E-01	
ERROR		0.56299E-01	4	0.14075E-01	
DESAJUSTE		0.47382E 00	5	0.94763E-01	6.733

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 1.87

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.22142E 02	-0.22500E 02	1.59
B 1	0.29260E 01	0.30000E 01	2.47
B 2	0.57167E 01	0.60000E 01	4.72
B 3	0.89883E 01	0.90000E 01	0.13
B 4	0.12205E 02	0.12000E 02	1.71
B 5	0.50286E 01	0.50000E 01	0.57

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F5- 6

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.19197E 05	21		
B 0	0.30165E 02	0.19109E 05	1	0.19109E 05	257402.120
B 1	0.30375E 00	0.19376E 01	1	0.19376E 01	26.099
B 2	0.73484E 00	0.11340E 02	1	0.11340E 02	152.749
B 3	0.10824E 01	0.24605E 02	1	0.24605E 02	331.428
B 4	0.14113E 01	0.41830E 02	1	0.41830E 02	563.455
B 5	0.60204E 00	0.76114E 01	1	0.76114E 01	102.527
RESIDUAL		0.59872E 00	15	0.39915E-01	
ERROR		0.29695E 00	4	0.74238E-01	
DESAJUSTE		0.30177E 00	11	0.27433E-01	0.370

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.10

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.21515E 02	-0.22500E 02	4.38
B 1	0.25313E 01	0.30000E 01	15.62
B 2	0.61237E 01	0.60000E 01	2.06
B 3	0.90202E 01	0.90000E 01	0.22
B 4	0.11761E 02	0.12000E 02	1.99
B 5	0.50170E 01	0.50000E 01	0.34

*** DISEÑO AXIAL ***

INCREMENTO 0.1000
PUNTO INICIAL 1.5000
SIMULACION F5-7

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F5- 7

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.13695E 05	15		
B 0	0.30169E 02	0.13652E 05	1	0.13652E 05	718004.930
B 1	0.33263E 00	0.16596E 01	1	0.16596E 01	87.281
B 2	0.62776E 00	0.59113E 01	1	0.59113E 01	310.883
B 3	0.85406E 00	0.10941E 02	1	0.10941E 02	575.420
B 4	0.11693E 01	0.20510E 02	1	0.20510E 02	1078.656
B 5	0.50332E 00	0.38000E 01	1	0.38000E 01	199.846
RESIDUAL		0.21703E 00	9	0.24114E-01	
ERROR		0.76057E-01	4	0.19014E-01	
DESAJUSTE		0.14097E 00	5	0.28194E-01	1.483

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 4.24

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.22138E 02	-0.22500E 02	1.61
B 1	0.33263E 01	0.30000E 01	10.88
B 2	0.62776E 01	0.60000E 01	4.63
B 3	0.85406E 01	0.90000E 01	5.10
B 4	0.11693E 02	0.12000E 02	2.56
B 5	0.50332E 01	0.50000E 01	0.66

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F5- 8

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.19114E 05	21		
B 0	0.30121E 02	0.19052E 05	1	0.19052E 05	514529.000
B 1	0.29673E 00	0.18490E 01	1	0.18490E 01	49.935
B 2	0.57839E 00	0.70252E 01	1	0.70252E 01	189.723
B 3	0.87004E 00	0.15896E 02	1	0.15896E 02	429.298
B 4	0.12190E 01	0.31207E 02	1	0.31207E 02	842.779
B 5	0.50402E 00	0.53348E 01	1	0.53348E 01	144.072
RESIDUAL		0.53890E 00	15	0.35927E-01	
ERROR		0.14812E 00	4	0.37029E-01	
DESAJUSTE		0.39079E 00	11	0.35526E-01	0.959

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.18

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.21903E 02	-0.22500E 02	2.65
B 1	0.29673E 01	0.30000E 01	1.09
B 2	0.57839E 01	0.60000E 01	3.60
B 3	0.87005E 01	0.90000E 01	3.33
B 4	0.12190E 02	0.12000E 02	1.59
B 5	0.50403E 01	0.50000E 01	0.81

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F5= 9

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.37885E 05	15		
B 0	0.50183E 02	0.37775E 05	1	0.37775E 05	275896.370
B 1	0.43971E 00	0.29002E 01	1	0.29002E 01	21.182
B 2	0.93469E 00	0.13105E 02	1	0.13105E 02	95.713
B 3	0.14360E 01	0.30932E 02	1	0.30932E 02	225.916
B 4	0.19303E 01	0.55894E 02	1	0.55894E 02	408.230
B 5	0.65189E 00	0.63744E 01	1	0.63744E 01	46.557
RESIDUAL		0.90070E 00	9	0.10008E 00	
ERROR		0.54767E 00	4	0.13692E 00	
DESAJUSTE		0.35303E 00	5	0.70606E-01	0.516

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 3.54

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.39695E 02	-0.40000E 02	0.76
B 1	0.36643E 01	0.40000E 01	8.39
B 2	0.77891E 01	0.80000E 01	2.64
B 3	0.11967E 02	0.12000E 02	0.28
B 4	0.16086E 02	0.16000E 02	0.54
B 5	0.54324E 01	0.50000E 01	8.65

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.1200

PUNTO INICIAL 2.0000

SIMULACION F5-10

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F5-10

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.52862E 05	21		
B 0	0.50100E 02	0.52709E 05	1	0.52709E 05	1305842.000
B 1	0.50421E 00	0.53388E 01	1	0.53388E 01	132.266
B 2	0.88992E 00	0.16631E 02	1	0.16631E 02	412.022
B 3	0.14308E 01	0.42993E 02	1	0.42993E 02	1065.134
B 4	0.19460E 01	0.79528E 02	1	0.79528E 02	1970.271
B 5	0.60444E 00	0.76722E 01	1	0.76722E 01	190.075
RESIDUAL		0.73084E 00	15	0.48723E-01	
ERROR		0.16146E 00	4	0.40364E-01	
DESAJUSTE		0.56938E 00	11	0.51762E-01	1.282

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 2.72

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.39491E 02	-0.40000E 02	1.27
B 1	0.42018E 01	0.40000E 01	5.04
B 2	0.74160E 01	0.80000E 01	7.30
B 3	0.11924E 02	0.12000E 02	0.64
B 4	0.16217E 02	0.16000E 02	1.36
B 5	0.50370E 01	0.50000E 01	0.74

*** DISEÑO AXIAL ***

INCREASING 0.1000

ACCOUNT INITIAL 2.0000

SIMULACION F5-11

[illegible]

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1 SIMULACION F5-11

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.37724E 05	15		
B 0	0.50100E 02	0.37650E 05	1	0.37650E 05	60632.930
B 1	0.39577E 00	0.23495E 01	1	0.23495E 01	37.857
B 2	0.83545E 00	0.10470E 02	1	0.10470E 02	168.691
B 3	0.11565E 01	0.20064E 02	1	0.20064E 02	323.280
B 4	0.15812E 01	0.37504E 02	1	0.37504E 02	604.275
B 5	0.41878E 00	0.26306E 01	1	0.26306E 01	42.386
RESIDUAL		0.92006E 00	9	0.10223E 00	
ERROR		0.24826E 00	4	0.62064E-01	
DESAJUSTE		0.67181E 00	5	0.13436E 00	2.165

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 5.40

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.37656E 02	-0.40000E 02	5.86
B 1	0.39577E 01	0.40000E 01	1.06
B 2	0.83545E 01	0.80000E 01	4.43
B 3	0.11565E 02	0.12000E 02	3.62
B 4	0.15812E 02	0.16000E 02	1.17
B 5	0.41878E 01	0.50000E 01	16.24

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADU 1 SIMULACION F5-12

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.53007E 05	21		
B 0	0.50189E 02	0.52898E 05	1	0.52898E 05	1399915.000
B 1	0.43445E 00	0.39636E 01	1	0.39636E 01	104.894
B 2	0.79978E 00	0.13433E 02	1	0.13433E 02	355.481
B 3	0.11968E 01	0.30079E 02	1	0.30079E 02	796.029
B 4	0.16370E 01	0.56274E 02	1	0.56274E 02	1489.251
B 5	0.41214E 00	0.35671E 01	1	0.35671E 01	94.401
RESIDUAL		0.11325E 01	15	0.75498E-01	
ERROR		0.15115E 00	4	0.37787E-01	
DESAJUSTE		0.98132E 00	11	0.89211E-01	2.361

APROXIMACION A LA ECUACION REAL
DESVIACION PORCENTUAL MEDIA : 5.04

	COEFICIENTE ESTIMADO	COEFICIENTE REAL	DESVIACION PORCENTUAL
B 0	-0.39414E 02	-0.40000E 02	1.46
B 1	0.43445E 01	0.40000E 01	8.61
B 2	0.79978E 01	0.80000E 01	0.03
B 3	0.11968E 02	0.12000E 02	0.27
B 4	0.16370E 02	0.16000E 02	2.31
B 5	0.41214E 01	0.50000E 01	17.57

*** DISEÑO FACTORIAL ***

INCREMENTO 0.1000

PUNTO INICIAL 2.0000

SIMULACION F5-12

[illegible]

4.1.3.- DISCUSION DE LOS RESULTADOS

Las tablas FM-1, FM-2, FM-3, FM-4 y FM-5 resumen esquemáticamente las desviaciones porcentuales - medias para los distintos coeficientes estimados, y para las distintas funciones estudiadas. Un estudio detenido de estos valores numéricos revela que no existen diferencias significativas ni a favor de los diseños axiales ni a favor de los factoriales (medias generales absolutas - 3,83 y 3,84% para diseños axiales y factoriales respectivamente).

Se observa además que en general a medida que aumenta el peso del coeficiente dentro de la ecuación, disminuye el error con que este es estimado, circunstancia que ya cabía esperar desde un punto de vista estadístico.

En general se puede concluir pues que los diseños axiales se muestran tan efectivos para la determinación de superficies de respuesta de primer orden, como lo pueden ser los factoriales.

Finalmente debe señalarse que todas las ecuaciones obtenidas son estadísticamente significativas al ser la F_{exp} inferior a la F_{tab} , que para 11 y 4 grados de libertad, a un nivel de probabilidad del 97,5%, - tiene un valor de 8,80.

Simulación	F1-1/2	F1-3/4	F1-5/6	F1-7/8	F1-9/10	F1-11/12	Media por coeficiente
Punto inicial	1,0	1,0	1,5	1,5	2,0	2,0	
Incrementos	0,0060	0,0050	0,0050	0,0040	0,0025	0,0015	
B0	0,80 2,67	2,17 1,42	0,59 0,07	2,05 0,53	1,71 1,56	1,42 5,90	1,46 2,03
B1	6,93 15,06	15,01 4,09	11,69 4,67	3,62 9,06	11,77 9,86	12,16 7,93	10,20 8,45
B2	0,10 0,93	5,88 10,36	2,70 3,82	2,63 0,82	3,31 2,86	1,53 9,30	2,69 4,68
B3	0,04 2,93	4,80 0,77	3,54 1,22	4,78 3,04	0,40 3,35	2,70 0,65	2,71 1,99
B4	2,29 1,62	5,38 1,42	0,20 0,83	0,09 2,92	5,00 1,00	4,02 8,44	2,83 2,71
B5	2,01 4,46	0,04 2,63	1,74 0,48	1,67 1,06	2,46 2,72	2,34 5,39	1,71 2,79
Media por simulación	2,03 4,61	6,55 3,45	3,41 1,85	2,47 2,90	4,11 3,56	4,03 6,27	3,60 3,77

Tabla FM-1

Desviaciones porcentuales de los coeficientes estimados
mediante los diseños axial y factorial (letra cursiva)

Simulación	F2-1/2	F2-3/4	F2-5/6	F2-7/8	F2-9/10	F2-11/12	Media por coeficiente
Punto inicial	1,00	1,00	1,50	1,50	2,00	2,00	
Incrementos	0,12	0,10	0,16	0,14	0,18	0,16	
B0	0,72	0,68	2,40	0,52	0,49	2,97	1,30
	0,50	2,39	0,76	0,45	0,75	1,64	1,08
B1	11,23	8,25	4,19	8,55	0,61	11,79	7,44
	12,93	6,18	10,00	2,16	1,30	14,34	7,81
B2	1,91	13,36	3,77	7,21	13,40	15,17	9,23
	4,39	5,60	2,84	0,11	5,85	15,93	5,79
B3	2,21	0,09	5,54	1,56	0,60	2,02	2,00
	1,67	12,48	6,17	0,21	3,29	8,61	5,40
B4	0,93	3,05	8,08	2,73	9,70	6,49	5,16
	3,41	2,33	5,69	1,42	2,79	5,02	3,44
B5	0,10	0,01	1,47	2,62	0,39	6,95	1,92
	1,21	1,67	0,14	4,04	2,52	0,20	1,63
Media por simulación	2,85	4,24	4,24	3,86	4,20	7,56	4,50
	4,02	5,11	4,27	1,40	2,75	7,63	4,19

Tabla FM-2

Desviaciones porcentuales de los coeficientes estimados
mediante los diseños axial y factorial (letra cursiva)

Simulación	F3-1/2	F3-3/4	F3-5/6	F3-7/8	F3-9/10	F3-11/12	Media por coeficiente
Punto inicial	2,00	2,00	2,50	2,50	3,00	3,00	
Incrementos	0,65	0,55	0,65	0,55	0,65	0,55	
B0	0,24 0,45	0,22 0,49	0,61 0,84	0,48 0,44	1,65 0,58	0,45 0,06	0,61 0,48
B1	8,90 14,57	1,03 9,04	12,01 5,40	6,88 1,96	8,50 8,27	13,69 2,63	8,50 6,98
B2	0,19 3,92	3,82 4,90	3,36 3,39	4,14 7,77	2,24 2,11	6,83 2,37	3,43 4,08
B3	0,05 0,04	2,09 1,45	4,11 7,83	0,61 3,29	5,59 1,09	4,25 5,52	2,78 3,20
B4	2,81 7,02	0,22 3,74	2,15 1,27	0,26 0,78	6,60 0,17	0,31 1,28	2,06 2,38
B5	2,06 0,01	2,11 3,10	1,31 1,05	0,52 0,86	1,59 3,74	0,37 5,36	1,33 2,45
Media por simulación	2,38 4,33	1,58 3,84	3,93 3,30	2,15 2,52	4,35 2,66	4,32 2,87	3,12 3,25

Tabla FM-3

Desviaciones porcentuales de los coeficientes estimados
mediante los diseños axial y factorial (letra cursiva)

Simulación	F4-1/2	F4-3/4	F4-5/6	F4-7/8	F4-9/10	F4-11/12	Media por coeficiente
Punto inicial	1,00	1,00	1,50	1,50	2,00	2,00	
Incrementos	0,08	0,05	0,08	0,05	0,09	0,06	
B0	2,22 0,47	4,56 2,42	1,32 5,93	1,79 7,67	2,72 7,84	7,70 1,68	3,38 4,33
B1	4,95 10,06	1,27 3,00	5,43 7,62	16,09 6,34	3,90 21,42	1,34 11,76	5,50 10,03
B2	0,34 4,22	9,71 10,06	8,69 4,38	7,16 5,14	6,61 1,75	5,85 0,09	6,39 4,27
B3	0,09 2,31	0,18 3,01	2,17 1,71	7,72 2,28	0,94 3,52	4,98 0,54	2,68 2,23
B4	2,24 0,58	6,50 3,79	0,69 1,11	3,83 1,66	2,25 3,06	1,55 3,01	2,84 2,20
Media por simulación	1,97 3,53	4,45 4,46	3,66 4,15	7,32 4,62	3,29 7,52	4,28 3,42	4,16 4,61

Tabla FM-4

Desviaciones porcentuales de los coeficientes estimados
mediante los diseños axial y factorial (letra cursiva)

Simulación	F5-1/2	F5-3/4	F5-5/6	F5-7/8	F5-9/10	F5-11/12	Media por coeficiente
Punto inicial	1,00	1,00	1,50	1,50	2,00	2,00	
Incrementos	0,11	0,09	0,12	0,10	0,12	0,10	
B0	3,14 2,91	2,86 4,10	1,59 4,38	1,61 2,65	0,76 1,27	5,86 1,46	2,64 2,79
B1	6,83 3,09	7,08 7,32	2,47 15,62	10,88 1,09	8,39 5,04	1,06 8,61	6,12 6,79
B2	7,69 0,21	2,32 2,18	4,72 2,06	4,63 3,60	2,64 7,30	4,43 0,03	4,40 2,56
B3	2,99 1,21	2,75 5,46	0,13 0,22	5,10 3,33	0,28 0,64	3,62 0,27	2,48 1,85
B4	2,16 0,93	2,62 0,06	1,71 1,99	1,56 1,59	0,54 1,36	1,17 2,31	1,79 1,37
B5	0,04 4,23	4,07 5,09	0,57 0,34	0,66 0,81	8,65 0,74	16,24 17,57	5,04 4,80
Media por simulación	3,81 2,10	3,62 4,04	1,87 4,10	4,24 2,18	3,54 2,71	5,40 5,04	3,75 3,36

Tabla FM-5

Desviaciones porcentuales de los coeficientes estimados
mediante los diseños axial y factorial (letra cursiva)

4.2.- SUPERFICIES DE SEGUNDO ORDEN

Tras los resultados obtenidos en el apartado 4.1, mediante los que se ha comprobado que diseños de primer orden de características estadísticas equivalentes conducen a ecuaciones estimadas similares, se ha decidido no efectuar simulación alguna sobre funciones multivariables para ajustar ecuaciones de segundo orden, dado que, igualmente, las características matemático estadísticas de los diseños propuestos son idénticas entre si y asimismo idénticas a las del diseño factorial compuesto.

4.3.- SUPERFICIES DE TERCER ORDEN

Para comprobar la bondad de los diseños - rotatorios de tercer orden se han efectuado asimismo simulaciones experimentales sobre funciones de dos variables.

El diseño de tercer orden elegido ha sido un octogonal combinado, de razón de radios $r=0,5$ y con cuatro puntos centrales.

En los apartados que siguen se expone el procedimiento seguido así como los resultados obtenidos.

4.3.1.- PROCEDIMIENTO

El procedimiento seguido puede esquematizarse en los siguientes puntos:

i) Elección de puntos iniciales e incrementos para las variables en la función seleccionada.

ii) Cálculo de la respuesta de la función seleccionada en los distintos puntos que forman el diseño experimental, mediante un pequeño calculador programable, el cual genera automáticamente el error para la respuesta.

iii) Estimación de la ecuación y realización del análisis de varianza correspondiente según lo expresado en 3.3.2 y en 3.3.3.

iv) Cambio de variables para la obtenen

ción de la ecuación referida a las coordenadas reales y comparación de los coeficientes con los correspondientes al desarrollo en serie de Taylor de la función considerada, hasta tercer orden.

4.3.2.- RESULTADOS OBTENIDOS

En los apartados siguientes se describen las dos funciones seleccionadas así como los resultados obtenidos con las mismas según el procedimiento anteriormente expuesto.

4.3.2.1.- Función F-6

Como función F-6 se ha designado a la función cuya expresión matemática es:

$$y = 10 + \ln x_1 + \ln x_2 \quad (4.6)$$

siendo los coeficientes del desarrollo en serie de Taylor hasta tercer orden que le corresponden los siguientes:

$$\begin{aligned} B_0 &= 19/3 \\ B_1 &= 3 \\ B_2 &= 3 \\ B_{11} &= -3/2 \\ B_{22} &= -3/2 \\ B_{12} &= 0 \\ B_{111} &= 1/3 \\ B_{222} &= 1/3 \\ B_{112} &= 0 \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$B_{122} = 0$$

resultando pues la siguiente aproximación polinomial para F-6:

$$\begin{aligned} y = & 6,33 + 3,00x_1 + 3,00x_2 - 1,50x_1^2 \\ & - 1,50x_2^2 + 0,33x_1^3 + 0,33x_2^3 \end{aligned} \quad (4.8)$$

El punto inicial (igual para ambas variables) y el incremento (asimismo idéntico para las dos) - para los que la ecuación ha mostrado ser estadísticamente significativa, bajo un error del 5% y a un nivel de probabilidad del 95%, son:

$$x_{i0} = 1,0 \quad (4.9)$$

$$\Delta x_i = 0,35 \quad (4.10)$$

Por tanto los cambios de variable procedentes son:

$$x'_1 = \frac{x_1 - 1,0}{0,35} \quad (4.11)$$

$$x'_2 = \frac{x_2 - 1,0}{0,35} \quad (4.12)$$

La tabla 4.1 muestra los resultados obtenidos, mientras que la 4.2 proporciona la ecuación y su análisis de varianza. Como se observa, la ecuación es significativa, ya que a un nivel de probabilidad del 95%

X1	X2	Y
1.000	1.000	10.6076
1.000	-1.000	9.8821
-1.000	1.000	9.8725
-1.000	-1.000	9.1393
1.414	0.0	10.4058
-1.414	0.0	9.3192
0.0	1.414	10.3896
0.0	-1.414	9.3153
0.500	0.500	10.3384
0.500	-0.500	9.9787
-0.500	0.500	9.9615
-0.500	-0.500	9.6120
0.707	0.0	10.2209
-0.707	0.0	9.7186
0.0	0.707	10.2328
0.0	-0.707	9.7300
0.0	0.0	9.9919
0.0	0.0	10.0087
0.0	0.0	10.0005
0.0	0.0	9.9900

Tabla 4.1

Resultados obtenidos con la función F-6

ANALISIS DE VARIANZA
ECUACION DE ORDEN 3

	COEFICIENTE	S. CUADRATICA	GL	M. CUADRATICA	FEXP
B0	0.10004E 02	0.19744E 04	1		
B1	0.35907E 00				
B2	0.24937E 00				
B11	0.12267E-01	0.27617E 01	6	0.46028E 00	6227.266
B22	0.15218E-01				
B112	0.17738E-03				
B122	-0.12474E-02				
B11	-0.66617E-01				
B22	-0.69987E-01	0.6+209E-01	3	0.21403E-01	289.565
B12	-0.12119E-02				
TOTAL		0.19772E 04	20		
RESIDUAL		0.26979E-02	10		
ERROR		0.22174E-03	3	0.73914E-04	
DESAJUSTE		0.24762E-02	7	0.35374E-03	4.786

Tabla 4.2

$F_{\text{tab}}(7,3)=8,59$ frente a $F_{\text{exp}}=4,79$. Los coeficientes son asimismo globalmente significativos ($F_{\text{tab}}(6,3)=8,94$ y -- $F_{\text{tab}}(3,3)=9,28$).

Transformando las coordenadas según las ecuaciones 4.11 y 4.12, se obtiene la ecuación en coordenadas reales:

$$\begin{aligned} y = & 6,239 + 2,961x_1 + 3,161x_2 - 1,406x_1^2 - 1,607x_2^2 + \\ & + 0,040x_1x_2 + 0,286x_1^3 + 0,355x_2^3 + \\ & + 0,004x_1^2x_2 - 0,029x_1x_2^2 \end{aligned} \quad (4.13)$$

la cual es comparable con la ecuación polinomial 4.8, obtenida por desarrollo en serie de Taylor.

Coef.	B0	1,49%
"	B1	1,30%
"	B2	5,38%
"	B11	6,25%
"	B22	7,13%
"	B111	14,10%
"	B222	6,59%

Tabla 4.3

Desviaciones porcentuales en la estimación de la función F-6.

$$\pm 4,077x_1^2x_2 \pm 4,077x_1x_2^2 \quad (4.16)$$

El punto inicial (igual para ambas variables) y el incremento (asimismo idéntico para las dos), para los que la ecuación ha mostrado ser estadísticamente significativa, bajo un error del 5% y a un nivel de probabilidad del 95%, son:

$$x_{i0} = 1,0 \quad (4.17)$$

$$\Delta x_i = 0,35 \quad (4.18)$$

Por tanto los cambios de variable procedentes son:

$$x'_1 = \frac{x_1 - 1,0}{0,35} \quad (4.19)$$

$$x'_2 = \frac{x_2 - 1,0}{0,35} \quad (4.20)$$

La tabla 4.4 muestra los resultados obtenidos, mientras que la 4.5 proporciona la ecuación y su análisis de varianza. Como se observa la ecuación es -- significativa, ya que a un nivel de probabilidad del 95% $F_{\text{tab}(7,3)}=8,89$ frente a $F_{\text{exp}}=8,86$. Los coeficientes -- son asimismo significativos considerados globalmente al ser $F_{\text{tab}(6,3)}=8,94$ y $F_{\text{tab}(3,3)}=9,28$.

Transformando las coordenadas según las ecuaciones 4.19 y 4.20 se obtiene la ecuación en coordenadas reales:

X1	X2	Y
1.000	1.000	6.1456
1.000	-1.000	2.4197
-1.000	1.000	2.4238
-1.000	-1.000	1.5196
1.414	0.0	4.4594
-1.414	0.0	1.6562
0.0	1.414	4.4468
0.0	-1.414	1.6604
0.500	0.500	3.9818
0.500	-0.500	2.6407
-0.500	0.500	2.6471
-0.500	-0.500	1.9706
0.707	0.0	3.4892
-0.707	0.0	2.1285
0.0	0.707	3.4788
0.0	-0.707	2.1224
0.0	0.0	2.7054
0.0	0.0	2.7255
0.0	0.0	2.7272
0.0	0.0	2.7385

Tabla 4.4

Resultados obtenidos con la función F-7

ANALISIS DE VARIANZA
ECUACION DE ORDEN 3

	COEFICIENTE	S.CUADRATICA	GL	M.CUADRATICA	FEXP
B0	0.27183E 01	0.16871E 03	1		
B1	0.95202E 00				
B2	0.95437E 00				
B111	0.19620E-01	0.22379E 02	6	0.37298E 01	19643.387
B222	0.15104E-01				
B112	0.18776E 00				
B122	0.18377E 00				
B11	0.18760E 00				
B22	0.18466E 00	0.25854E 01	3	0.86180E 00	4538.754
B12	0.70303E 00				
TOTAL		0.19368E 03	20		
RESIDUAL		0.12344E-01	10		
ERROR		0.56962E-03	3	0.18987E-03	
DESAJUSTE		0.11775E-01	7	0.16821E-02	8.859

Tabla 4.5

$$\begin{aligned}
 y = & -3,428 + 8,336x_1 + 7,983x_2 - 4,221x_1^2 - \\
 & - 3,836x_2^2 - 11,592x_1x_2 + 0,458x_1^3 + \\
 & + 0,352x_2^3 + 4,379x_1^2x_2 + 4,286x_1x_2^2 \quad (4.21)
 \end{aligned}$$

la cual es comparable con la ecuación polinomial 4.16 obtenida por desarrollo en serie de Taylor. Las desviaciones porcentuales respecto a los coeficientes de esta misma ecuación se muestran en la tabla 4.6.

Coef.	B0	5,42%
"	B1	2,22%
"	B2	2,11%
"	B11	3,52%
"	B22	5,92%
"	B12	6,61%
"	B111	1,02%
"	B222	22,23%
"	B112	7,41%
"	B122	5,13%

Tabla 4.6

Desviaciones porcentuales en la estimación de la función F-7

4.3.3.- DISCUSION DE LOS RESULTADOS

Los resultados obtenidos mediante los diseños octogonales combinados muestran la plena validez - de los mismos para la estimación de ecuaciones de primer orden. En efecto, las desviaciones observadas en los -- coeficientes estimados respecto a los reales - tablas -- 4.3 y 4.6 - son ciertamente muy aceptables. Conviene -- mencionar al respecto que las desviaciones observadas en los coeficientes de las ecuaciones cúbicas son en términos medios superiores a las de los coeficientes de las ecuaciones de primer orden. Este hecho resulta lógico si se recuerda que la varianza de los diseños de tercer orden es comparativamente superior a la de los diseños de menor orden.

5.- E S T U D I O E X P E R I M E N T A L Y

D I S C U S I O N D E L O S R E S U L T A D O S

Se han elegido dos casos prácticos para el estudio comparativo de distintos diseños en cinco dimensiones (primer orden) y dos dimensiones (segundo y --tercer orden). En los siguientes apartados se exponen las particularidades de cada uno de ellos, los resultados obtenidos, y su discusión en comparación con los correspondientes del apartado 4.

5.1.- ESTUDIO EXPERIMENTAL DE LOS DISEÑOS DE PRIMER ORDEN

Para el estudio de los diseños rotatorios de primer orden, se ha elegido como problema la preparación de una composición detergente, en la que interviene una amida obtenida mediante reacción bajo distintas condiciones experimentales. Existen cinco variables independientes, y la respuesta es la viscosidad de la composición medida a 25°C.

En este estudio se ha comprobado experimentalmente la eficacia de un diseño axial, frente a la de un diseño 2^5 factorial fraccionado.

5.1.1.- PRODUCTOS Y DISPOSITIVO EXPERIMENTAL

La formulación objeto de estudio y que se mantiene constante es:

15% Lauril eter sulfato sódico al 25%
5% Amida producto de reacción
0,5% Cloruro sódico
79,5% Agua desionizada

La variación de la viscosidad de la formulación vendrá impuesta exclusivamente por las características de la amida, obtenida por reacción de los siguientes productos:

- Dietanolamina
- Aceite de coco

- Esteres metílicos
- Glicerina

los cuales reaccionan para dar lugar a una mezcla compleja de dietanolaminas láuricas y de coco con glicéridos - de estos mismos radicales.

Como catalizador de la reacción se añade el 0,5% en peso de metilato sódico sobre el peso total - de la mezcla reaccionante, disuelto al 10% en metanol.

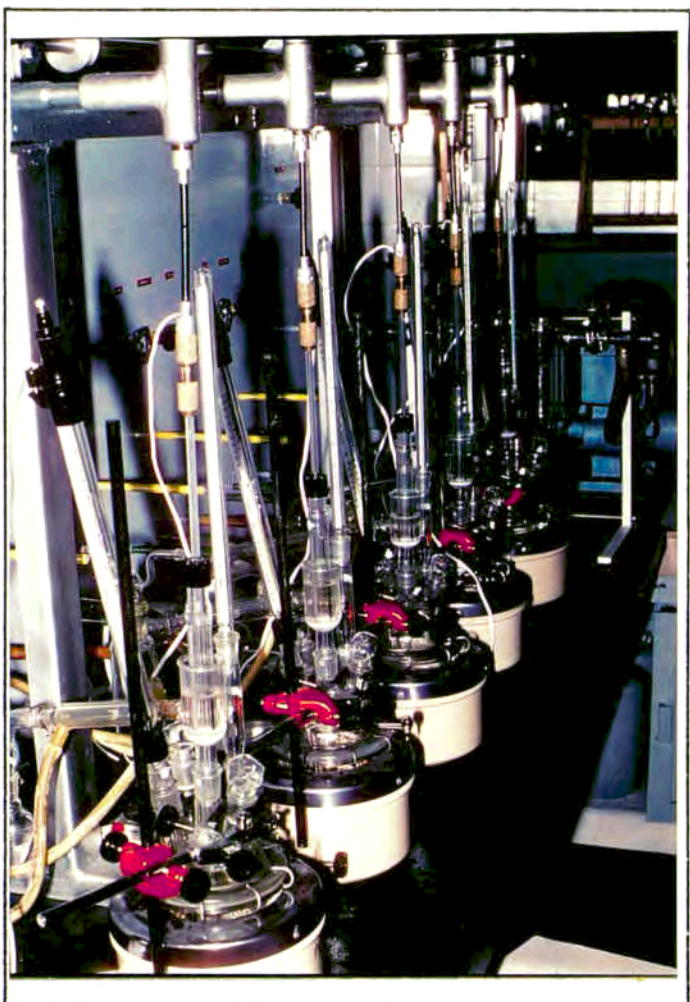
Las reacciones se han llevado a cabo en - una batería de cinco reactores de laboratorio con agitación (Fotografías 3.1 y 3.2). Cada uno de ellos, con una capacidad de 250 ml, contenía 150 g de mezcla reaccionante. La temperatura de la reacción se ha regulado mediante un termómetro de contacto, que actúa de elemento de control de la manta calefactora. El tiempo de la reacción ha sido variable y durante su transcurso se recogía el metanol destilado. Este hecho daba cuenta de la marcha de la reacción. Finalmente y para eliminar los - restos de metanol que pudieran existir, se conectaba el sistema durante 20 minutos a un vacío de unos 40 mm de - mercurio.

Todas las composiciones han tenido un peso constante e igual a 270 g, y se ha utilizado para su preparación una balanza granatario de precisión $\pm 0,01$ g. Para asegurar la uniformidad de la temperatura todas las muestras se han termostatado a 25°C durante un tiempo aproximado de doce horas.

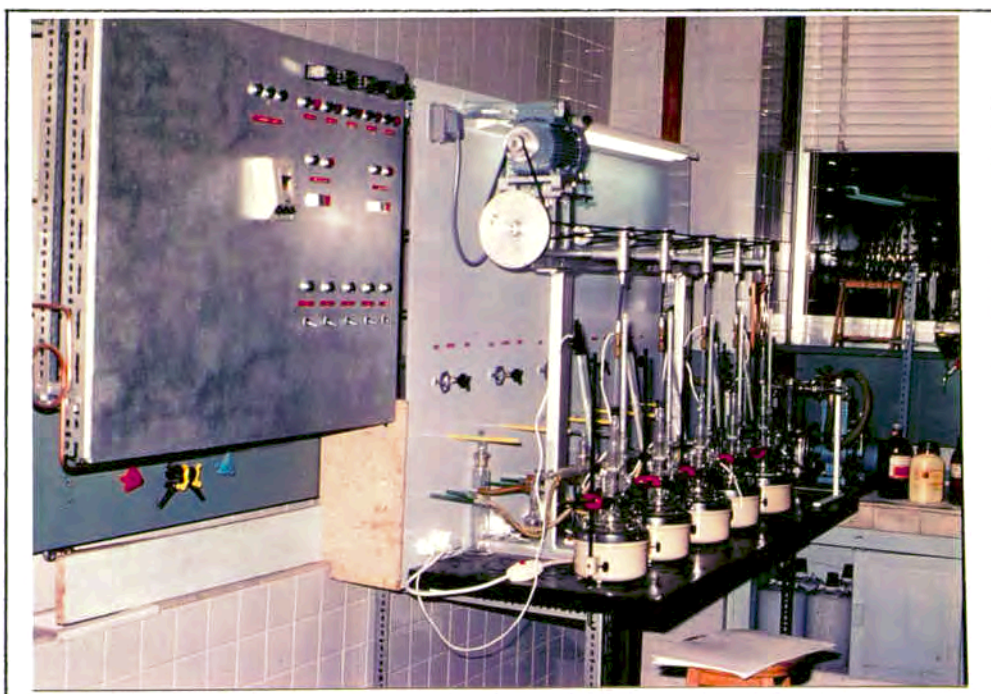
La medición de las viscosidades se ha realizado mediante un viscosímetro Brookfield, modelo LV1.

Fotografía 3.1

Dispositivo
experimental



Fotografía 3.2



5.1.2.- VARIABLES Y LIMITACIONES EN LAS MISMAS

Como variables se han elegido las siguientes relaciones adimensionales:

$$X_1 = G/DEA \quad (5.1)$$

$$X_2 = DEA/(EM+AC) \quad (5.2)$$

$$X_3 = EM/AC \quad (5.3)$$

donde G se refiere a los moles de glicerina, DEA a los de dietanolamina, EM a los de ésteres metílicos y AC a los de aceite de coco.

Las restantes variables son:

$$X_4 = \text{tiempo de reacción} \quad (5.4)$$

$$X_5 = \text{temperatura} \quad (5.5)$$

Dado que los excesos de aceite de coco o bien de ésteres metílicos sobre la dietanolamina limitan la conversión de ester a amida, y siendo ambos amidificables, se deberá mantener la relación:

$$DEA/(EM+3AC) \geq 1 \quad (5.6)$$

Los moles de aceite de coco vienen multiplicados por tres debido a que contienen tres grupos amidificables. Desarrollando la ecuación 5.6 en función de las variables anteriormente definidas se llega fácilmente a la siguiente relación:

$$X_2 - 1 \geq \frac{2}{1 + X_3} \quad (5.7)$$

que expresa las limitaciones de tipo cuadrático a que se ven sometidas las variables.

5.1.3.- RESULTADOS EXPERIMENTALES

Como punto inicial de esta experimentación y asimismo como centro de ambos diseños, se ha elegido el punto de coordenadas:

$$X_1 = 0,5706 \quad (5.8)$$

$$X_2 = 1,5470 \quad (5.9)$$

$$X_3 = 7,0851 \quad (5.10)$$

$$X_4 = 5,0 \text{ hr.} \quad (5.11)$$

$$X_5 = 130^\circ\text{C} \quad (5.12)$$

que corresponden a unos pesos respectivos de dietanolamina, aceite de coco, ésteres metílicos y glicerina de 60, 30,70 y 30 g.

Los resultados obtenidos se exponen separadamente en los siguientes subapartados de acuerdo con el diseño a que pertenecen.

5.1.3.1.- Resultados obtenidos con el diseño 2^5 factorial fraccionado

Los incrementos adoptados para las variables han sido los siguientes:

$$\Delta X_1 = 0,25 \quad (5.13)$$

$$\Delta X_2 = 0,10 \quad (5.14)$$

$$\Delta X_3 = 0,60 \quad (5.15)$$

$$\Delta X_4 = 2,0 \text{ hr.} \quad (5.16)$$

$$\Delta X_5 = 10^\circ\text{C} \quad (5.17)$$

Las variables, así pues, han sido ortogonalizadas de acuerdo con la siguiente transformación:

$$X'_1 = \frac{X_1 - 0,5706}{0,25} \quad (5.18)$$

$$X'_2 = \frac{X_2 - 1,5470}{0,10} \quad (5.19)$$

$$X'_3 = \frac{X_3 - 7,0851}{0,60} \quad (5.20)$$

$$X'_4 = \frac{X_4 - 5,0}{2,0} \quad (5.21)$$

$$X'_5 = \frac{X_5 - 130}{10} \quad (5.22)$$

Los resultados obtenidos en el diseño 2^5

factorial fraccionado se muestran en la tabla 5.1, mientras que la ecuación y el análisis de varianza correspondiente se muestran en la tabla 5.2. Como puede observarse, la ecuación es globalmente no significativa a un nivel de probabilidad del 95% ($F_{\text{exp}}=20,25$ frente a $F_{\text{tab}} = 8,77$ para 11 y 3 grados de libertad), siendo únicamente significativos los coeficientes B1 y B2 ($F_{\text{tab}(1,3)}=10,1$). Dado que la variable X_1 es la que contribuye al desajuste en una proporción notablemente superior e interesando que la ecuación cubra una región experimental lo más amplia posible, se ha decidido reducir exclusivamente su intervalo, quedando de esta forma los siguientes incrementos para las variables:

$$\Delta X_1 = 0,15 \quad (5.23)$$

$$\Delta X_2 = 0,10 \quad (5.24)$$

$$\Delta X_3 = 0,60 \quad (5.25)$$

$$\Delta X_4 = 2,0 \text{ hr.} \quad (5.26)$$

$$\Delta X_5 = 10^\circ\text{C} \quad (5.27)$$

Se han repetido pues los dieciseis puntos correspondientes a la fracción de hipercubo, conservándose los cuatro puntos centrales.

La tabla 5.3 muestra la matriz de diseño así como los resultados obtenidos, mientras que la 5.4 muestra la ecuación ajustada y su análisis de varianza. A partir de las F tabuladas (nivel de probabilidad del 95%) anteriormente expresadas, se concluye que la ecuación es globalmente significativa, siéndolo también los coeficientes correspondientes a las variables X_1 y X_2 .

El cambio de variables que procede tras -

X0	X1	X2	X3	X4	X5	Visc.
1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	70.00
1.000	1.000	1.000	1.000	-1.000	-1.000	110.00
1.000	1.000	1.000	-1.000	1.000	-1.000	120.00
1.000	1.000	1.000	-1.000	-1.000	1.000	110.00
1.000	1.000	-1.000	1.000	1.000	-1.000	125.00
1.000	1.000	-1.000	1.000	-1.000	1.000	190.00
1.000	1.000	-1.000	-1.000	1.000	1.000	120.00
1.000	1.000	-1.000	-1.000	-1.000	-1.000	230.00
1.000	-1.000	1.000	1.000	1.000	-1.000	1420.00
1.000	-1.000	1.000	1.000	-1.000	1.000	1270.00
1.000	-1.000	1.000	-1.000	1.000	1.000	1400.00
1.000	-1.000	1.000	-1.000	-1.000	-1.000	1500.00
1.000	-1.000	-1.000	1.000	1.000	1.000	1490.00
1.000	-1.000	-1.000	1.000	-1.000	-1.000	1540.00
1.000	-1.000	-1.000	-1.000	1.000	-1.000	1510.00
1.000	-1.000	-1.000	-1.000	-1.000	1.000	1520.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	550.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	500.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	575.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	520.00

Tabla 5.1

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.18344F 08	20		
B 0	0.74900E 03	0.11220E 08	1	0.11220E 08	10297.530
B 1	-0.65231E 03	0.60136F 07	1	0.60136E 07	6258.012
B 2	-0.2138E 02	0.43577E 05	1	0.43577E 05	39.994
B 3	-0.19063E 02	0.58141E 04	1	0.58141E 04	5.335
B 4	-0.65625E 01	0.62906E 03	1	0.62906E 03	0.632
B 5	-0.24038E 02	0.97516E 04	1	0.97516E 04	8.950
RESIDUAL		0.24596E 06	14	0.17568E 05	
ERROR		0.32688E 04	3	0.10896E 04	
DESAJUSTE		0.24269E 06	11	0.22063E 05	20.249

Tabla 5.2

X0	X1	X2	X3	X4	X5	VISC.
1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	220.00
1.000	1.000	1.000	1.000	-1.000	-1.000	295.00
1.000	1.000	1.000	-1.000	1.000	-1.000	290.00
1.000	1.000	1.000	-1.000	-1.000	1.000	255.00
1.000	1.000	-1.000	1.000	1.000	-1.000	345.00
1.000	1.000	-1.000	1.000	-1.000	1.000	360.00
1.000	1.000	-1.000	-1.000	1.000	1.000	360.00
1.000	1.000	-1.000	-1.000	-1.000	-1.000	420.00
1.000	-1.000	1.000	1.000	1.000	-1.000	600.00
1.000	-1.000	1.000	1.000	-1.000	1.000	620.00
1.000	-1.000	1.000	-1.000	1.000	1.000	600.00
1.000	-1.000	1.000	-1.000	-1.000	-1.000	665.00
1.000	-1.000	-1.000	1.000	1.000	1.000	645.00
1.000	-1.000	-1.000	1.000	-1.000	-1.000	730.00
1.000	-1.000	-1.000	-1.000	1.000	-1.000	745.00
1.000	-1.000	-1.000	-1.000	-1.000	1.000	730.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	550.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	500.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	575.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	520.00

Tabla 5.3

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	NEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.55762E 07	20		
B 0	0.50125E 03	0.50250E 07	1	0.50250E 07	4611.883
B 1	-0.17437E 03	0.48651E 06	1	0.48651E 06	446.507
B 2	-0.49375E 02	0.39006E 05	1	0.39006E 05	35.799
B 3	-0.15625E 02	0.39063E 04	1	0.39063E 04	3.585
B 4	-0.16875E 02	0.45562E 04	1	0.45562E 04	4.182
B 5	-0.18750E 02	0.56250E 04	1	0.56250E 04	5.163
RESIDUAL		0.11544E 05	14	0.82457E 03	
ERROR		0.32688E 04	3	0.10896E 04	
DESAJUSTE		0.82752E 04	11	0.75230E 03	0.690

Tabla 5.4

el nuevo incremento adoptado se expresa en las siguientes ecuaciones:

$$X'_1 = \frac{X_1 - 0,5706}{0,15} \quad (5.28)$$

$$X'_2 = \frac{X_2 - 1,5470}{0,10} \quad (5.29)$$

$$X'_3 = \frac{X_3 - 7,0851}{0,60} \quad (5.30)$$

$$X'_4 = \frac{X_4 - 5,000}{2,0} \quad (5.31)$$

$$X'_5 = \frac{X_5 - 130}{10} \quad (5.32)$$

De acuerdo con ellas la ecuación obtenida en términos de las variables reales es:

$$y = 2398,83 - 1162,47X_1 - 493,75X_2 - 26,04X_3 - 8,44X_4 - 1,88X_5 \quad (5.33)$$

A partir de estos resultados se ha decidido desplazar las condiciones operativas hacia la región de viscosidades más altas, siguiendo la línea de máxima pendiente según el método de Box - Wilson. Las ecuaciones de la recta de ascenso, calculadas a partir de los coeficientes que figuran en la tabla 5.4, son las si----

guientes:

$$\mu X_1' = -174,370 \quad (5.34)$$

$$\mu X_2' = -49,375 \quad (5.35)$$

$$\mu X_3' = -15,625 \quad (5.36)$$

$$\mu X_4' = -16,875 \quad (5.37)$$

$$\mu X_5' = -18,750 \quad (5.38)$$

Como puede observarse, se han incluido en la recta de ascenso los coeficientes no significativos. Esto es debido a que no existe razón alguna para efectuar la hipótesis de que sean realmente nulos, y, en todo caso, los valores utilizados corresponden a los mejores estimados -- disponibles. La tabla 5.5 reproduce los resultados obtenidos en el ascenso. Se observará que a partir del experimento A3 se ha llegado al límite para la variable X_1 ($X_1=0$), manteniéndose en este nivel a lo largo de esta serie experimental. La recta de ascenso se ha dado por finalizada al alcanzarse la línea límite para las variables X_2 y X_3 (ecuación 5.7). Puesto que la variable X_3 no es significativa según la ecuación obtenida, se ha -- pensado que podría ser conveniente aumentarla siguiendo la línea límite, de modo que X_2 disminuyese. Así se ha realizado un experimento (B1) en el punto de coordenadas

$$X_1 = 0,00 \quad (5.39)$$

$$X_2 = 1,22 \quad (5.40)$$

$$X_3 = 8,09 \quad (5.41)$$

$$X_4 = 2,90 \text{ hr.} \quad (5.42)$$

$$X_5 = 117^\circ\text{C} \quad (5.43)$$

Exp.	A1	A2	A3	A4	A5	A6
X_1'	-2,000	-3,000	-3,804	-3,804	-3,804	-3,804
X_2'	-0,566	-0,849	-1,300	-1,800	-2,300	-2,821
X_3'	-0,179	-0,269	-0,411	-0,570	-0,728	-0,893
X_4'	-0,194	-0,290	-0,444	-0,615	-0,786	-0,964
X_5'	-0,215	-0,323	-0,494	-0,684	-0,873	-1,071
Visc.(cp.)	2300	2750	4100	4460	4660	4790

Tabla 5.5

Recta de ascenso correspondiente al diseño factorial

La viscosidad obtenida es de 4680 cp., lo que no representa mejora alguna respecto al último resultado, por lo que el punto A5 de coordenadas

$$\begin{aligned} X_1 &= 0,0000 & (5.44) \\ X_2 &= 1,2650 & (5.45) \\ X_3 &= 6,5490 & (5.46) \\ X_4 &= 3,07 \text{ hr.} & (5.47) \\ X_5 &= 119^{\circ}\text{C} & (5.48) \end{aligned}$$

con una viscosidad de 4790 cp. se ha aceptado como óptimo.

Finalmente se ha completado el estudio -- con un diseño 2^5 factorial fraccionado 1/2 en la subregión aceptada como óptima, a fin de conocer la influencia de las variables en esta zona. Los resultados del mismo se exponen en las tablas 5.6 y 5.7. El punto central del diseño es el correspondiente a las coordenadas:

$$\begin{aligned} X_1 &= 0,335 & (5.49) \\ X_2 &= 1,470 & (5.50) \\ X_3 &= 7,200 & (5.51) \\ X_4 &= 4,5 \text{ hr.} & (5.52) \\ X_5 &= 120^{\circ}\text{C} & (5.53) \end{aligned}$$

mientras que los incrementos respectivos se han conservado iguales que los utilizados en el último diseño (ecuaciones 5.23 a 5.27). Por tanto los cambios adecuados de variable son:

X0	X1	X2	X3	X4	X5	VISC.
1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	64.00
1.000	1.000	1.000	1.000	-1.000	-1.000	265.00
1.000	1.000	1.000	-1.000	1.000	-1.000	470.00
1.000	1.000	1.000	-1.000	-1.000	1.000	550.00
1.000	1.000	-1.000	1.000	1.000	-1.000	925.00
1.000	1.000	-1.000	1.000	-1.000	1.000	985.00
1.000	1.000	-1.000	-1.000	1.000	1.000	1155.00
1.000	1.000	-1.000	-1.000	-1.000	-1.000	1475.00
1.000	-1.000	1.000	1.000	1.000	-1.000	2060.00
1.000	-1.000	1.000	1.000	-1.000	1.000	2195.00
1.000	-1.000	1.000	-1.000	1.000	1.000	2500.00
1.000	-1.000	1.000	-1.000	-1.000	-1.000	2715.00
1.000	-1.000	-1.000	1.000	1.000	1.000	2885.00
1.000	-1.000	-1.000	1.000	-1.000	-1.000	3075.00
1.000	-1.000	-1.000	-1.000	1.000	-1.000	3190.00
1.000	-1.000	-1.000	-1.000	-1.000	1.000	3430.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1800.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1840.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1700.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1650.00

Tabla 5.6

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.8034E 08	20		
B 0	0.17479E 04	0.61107E 08	1	0.61107E 08	7944.516
B 1	-0.10082E 04	0.16263E 08	1	0.16263E 08	2114.376
B 2	-0.39569E 03	0.25051E 07	1	0.25051E 07	325.690
B 3	-0.19131E 03	0.58561E 06	1	0.58561E 06	76.135
B 4	-0.96138E 02	0.12443E 06	1	0.12443E 06	16.178
B 5	-0.23613E 02	0.90726E 04	1	0.90726E 04	1.180
RESIDUAL		0.50334E 05	14	0.35953E 04	
ERROR		0.23075E 05	3	0.76917E 04	
DESARAJUSTE		0.27259E 05	11	0.24761E 04	0.322

Tabla 5.7

$$X'_1 = \frac{X_1 - 0,335}{0,15} \quad (5.54)$$

$$X'_2 = \frac{X_2 - 1,470}{0,10} \quad (5.55)$$

$$X'_3 = \frac{X_3 - 7,200}{0,60} \quad (5.56)$$

$$X'_4 = \frac{X_4 - 4,50}{2,0} \quad (5.57)$$

$$X'_5 = \frac{X_5 - 120}{10} \quad (5.58)$$

La ecuación obtenida es globalmente significativa, así como todos los coeficientes a excepción de B5, a un nivel de probabilidad del 95% ($F_{\text{tab}(11,3)} = 8,77$ y $F_{\text{tab}(1,3)} = 10,10$). En términos de las variables reales la ecuación se expresa:

$$y = 12335,45 - 6721,33X_1 - 3956,9X_2 - 318,85X_3 - 44,09X_4 - 2,38X_5 \quad (5.59)$$

5.1.3.2.- Resultados obtenidos con el diseño axial

Paralelamente a la experimentación descrita en el apartado anterior, se han efectuado distintos -

diseños axiales cubriendo las mismas regiones experimentales. Para cumplir este último requisito, los incrementos adoptados para las variables han sido los siguientes:

$$\Delta X_1 = 0,559 \quad (5.60)$$

$$\Delta X_2 = 0,224 \quad (5.61)$$

$$\Delta X_3 = 1,342 \quad (5.62)$$

$$\Delta X_4 = 4,472 \text{ hr.} \quad (5.63)$$

$$\Delta X_5 = 22,360^\circ\text{C} \quad (5.64)$$

mientras que el punto inicial viene dado por las ecuaciones 5.8 a 5.12.

La matriz de diseño correspondiente así - como los resultados experimentales se muestran en la tabla 5.8. La ecuación ajustada y su análisis de varianza se exponen en la tabla 5.9. Dado que la ecuación resulta globalmente no significativa ($F_{\text{tab}(5,3)} = 9,01$), se ha procedido de acuerdo con lo expresado en el apartado 3.1.1.3, a la reducción selectiva de la variable X_1 , que es la que contribuye de forma notablemente superior a la de las demás al desajuste del modelo de primer orden. El nuevo incremento para X_1 se ha elegido de manera que cubriese la misma zona experimental que el diseño factorial (ecuaciones 5.23 a 5.27), así:

$$\Delta X_1 = 0,335 \quad (5.65)$$

Los incrementos para las demás variables siguen siendo - los mismos (ecuaciones 5.61 a 5.64). Los cambios de variable procedentes son ahora :

$$X'_1 = \frac{X_1 - 0,5706}{0,335} \quad (5.66)$$

XC	X1	X2	X3	X4	X5	VISC.
1.000	1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	50.00
1.000	-1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	2570.00
1.000	0.0	1.000	0.0	0.0	0.0	520.00
1.000	0.0	-1.000	0.0	0.0	0.0	720.00
1.000	0.0	0.0	1.000	0.0	0.0	600.00
1.000	0.0	0.0	-1.000	0.0	0.0	650.00
1.000	0.0	0.0	0.0	1.000	0.0	630.00
1.000	0.0	0.0	0.0	-1.000	0.0	670.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	1.000	590.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	-1.000	645.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	550.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	500.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	575.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	520.00

Tabla 5.8

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.10942E 06	14		
B 0	0.69929E 03	0.68460E 07	1	0.68460E 07	6283.141
B 1	-0.12600E 04	0.31752E 07	1	0.31752E 07	2914.142
B 2	-0.10000E 03	0.20000E 05	1	0.20000E 05	18.356
B 3	-0.25000E 02	0.12500E 04	1	0.12500E 04	1.147
B 4	-0.20000E 02	0.80000E 03	1	0.80000E 03	0.734
B 5	-0.27500E 02	0.15125E 04	1	0.15125E 04	1.388
RESIDUAL		0.89738E 06	8	0.11217E 06	
ERROR		0.32688E 04	3	0.10896E 04	
DESARAJSTE		0.89411E 06	5	0.17882E 06	164.120

Tabla 5.9

$$X_2' = \frac{X_2 - 1,547}{0,224} \quad (5.67)$$

$$X_3' = \frac{X_3 - 7,085}{1,342} \quad (5.68)$$

$$X_4' = \frac{X_4 - 5,00}{4,472} \quad (5.69)$$

$$X_5' = \frac{X_5 - 130}{22,36} \quad (5.70)$$

Los resultados tras la repetición de los dos experimentos correspondientes a la variable reducida se muestran conjuntamente con la matriz de diseño en la tabla 5.10. La ecuación y el análisis de varianza asociado se exponen en la tabla 5.11. Como puede observarse, la ecuación resulta globalmente significativa, no -- siendo, por el contrario, significativos los coeficien-- tes asociados con las variables X_3 , X_4 , y X_5 .

La ecuación en términos de las variables reales es la siguiente:

$$y = 2365,95 - 1350,74X_1 - 446,43X_2 - 18,63X_3 - \\ - 4,47X_4 - 1,23X_5 \quad (5.71)$$

Igualmente en este punto se ha decidido -- el desplazamiento hacia la región óptima de viscosidades según el método de Box - Wilson. Las ecuaciones de la -- recta de ascenso, calculadas a partir de los coeficien--

X0	X1	X2	X3	X4	X5	VISC.
1.000	1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	95.00
1.000	-1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	1000.00
1.000	0.0	1.000	0.0	0.0	0.0	520.00
1.000	0.0	-1.000	0.0	0.0	0.0	720.00
1.000	0.0	0.0	-1.000	0.0	0.0	600.00
1.000	0.0	0.0	-1.000	0.0	0.0	650.00
1.000	0.0	0.0	0.0	1.000	0.0	630.00
1.000	0.0	0.0	0.0	-1.000	0.0	670.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	1.000	590.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	-1.000	645.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	550.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	500.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	575.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	520.00

Tabla 5.10

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.53438E 07	14		
B 0	0.59035E 03	0.44793E 07	1	0.44793E 07	4478.133
B 1	-0.43250E 03	0.40951E 06	1	0.40951E 06	375.843
B 2	-0.10000E 03	0.20000E 05	1	0.20000E 05	18.356
B 3	-0.25000E 02	0.12500E 04	1	0.12500E 04	1.147
B 4	-0.20000E 02	0.80000E 03	1	0.80000E 03	0.734
B 5	-0.27500E 02	0.15125E 04	1	0.15125E 04	1.328
RESIDUAL		0.31399E 05	8	0.39249E 04	
ERROR		0.32688E 04	3	0.10896E 04	
DESAJUSTE		0.22130E 05	5	0.56260E 04	5.163

Tabla 5.11

tes que aparecen en la tabla 5.11, son las siguientes:

$$\mu X_1' = -452,50 \quad (5.72)$$

$$\mu X_2' = -100,00 \quad (5.73)$$

$$\mu X_3' = -25,00 \quad (5.74)$$

$$\mu X_4' = -20,00 \quad (5.75)$$

$$\mu X_5' = -27,50 \quad (5.76)$$

De la misma forma que en las ecuaciones 5.33 a 5.38, se han incluido los coeficientes no significativos por las razones ya comentadas en aquel punto. La tabla 5.12, reproduce los resultados obtenidos en el ascenso. Se observa igualmente que a partir del experimento C2 se alcanza al límite para la variable X_1 ($X_1=0$), manteniéndose en este nivel a lo largo de esta serie experimental. La recta de ascenso se ha dado por finalizada al alcanzarse la línea límite (ecuación 5.7) para las variables X_2 y X_3 .

Finalmente se ha realizado en diseño axial en esta subregión, a fin de conocer la influencia de las variables en la zona óptima, y asimismo disponer de otra base para la comparación de estos diseños. Por esta misma razón y dado que las condiciones de las variables significativas X_1 y X_2 en el experimento C6 son prácticamente las mismas que las correspondientes al experimento A6, se ha centrado el diseño axial en el mismo punto que el diseño factorial fraccionado y cuyas coordenadas son las expresadas en las ecuaciones 5.49 a 5.53. Los incrementos elegidos de manera que la región experimental explorada sea la misma vienen dados por las ecuaciones 5.61 a 5.65. De esta forma, los cambios de variable adecuados son:

Exp.	C1	C2	C3	C4	C5	C6
X'_1	-1,500	-1,703	-1,703	-1,703	-1,703	-1,703
X'_2	-0,331	-0,500	-0,700	-0,900	-1,100	-1,277
X'_3	-0,083	-0,125	-0,175	-0,225	-0,275	-0,320
X'_4	-0,066	-0,100	-0,140	-0,180	-0,220	-0,255
X'_5	-0,091	-0,138	-0,192	-0,248	-0,303	-0,351
Visc.(cp.)	2100	2500	2870	3325	3900	4800

Tabla 5.12

Recta de ascenso correspondiente al diseño axial

$$X'_1 = \frac{X_1 - 0,335}{0,335} \quad (5.77)$$

$$X'_2 = \frac{X_2 - 1,470}{0,224} \quad (5.78)$$

$$X'_3 = \frac{X_3 - 7,200}{1,342} \quad (5.79)$$

$$X'_4 = \frac{X_4 - 4,50}{4,47} \quad (5.80)$$

$$X'_5 = \frac{X_5 - 120}{22,36} \quad (5.81)$$

Las tablas 5.13 y 5.14 muestran los resultados obtenidos, la matriz de diseño, el análisis de varianza y la ecuación estimada. Como puede observarse, ésta es globalmente significativa a un nivel de probabilidad del 95%, al igual que todos sus coeficientes, a excepción del B5.

La ecuación obtenida en función de las variables reales es la siguiente:

$$y = 12817,78 - 6170,15X_1 - 4095,98X_2 - 335,32X_3 - \\ - 43,05X_4 - 2,46X_5 \quad (5.82)$$

X0	X1	X2	X3	X4	X5	VISC.
1.000	1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	61.00
1.000	-1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	4195.00
1.000	0.0	1.000	0.0	0.0	0.0	875.00
1.000	0.0	-1.000	0.0	0.0	0.0	2710.00
1.000	0.0	0.0	1.000	0.0	0.0	1350.00
1.000	0.0	0.0	-1.000	0.0	0.0	2250.00
1.000	0.0	0.0	0.0	1.000	0.0	1550.00
1.000	0.0	0.0	0.0	-1.000	0.0	1935.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	1.000	1760.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	-1.000	1870.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1800.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1840.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1700.00
1.000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1650.00

Tabla 5.13

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 1

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.57570E 08	14		
B 0	0.18247E 04	0.44614E 08	1	0.46614E 08	6060.344
B 1	-0.20670E 04	0.85450E 07	1	0.85450E 07	1110.940
B 2	-0.91750E 03	0.16836E 07	1	0.16836E 07	216.880
B 3	-0.45000E 03	0.40500E 06	1	0.40500E 06	52.654
B 4	-0.19250E 03	0.74112E 05	1	0.74112E 05	9.635
B 5	-0.55000E 02	0.60500E 04	1	0.60500E 04	0.727
RESIDUAL		0.24785E 06	8	0.30981E 05	
ERROR		0.23075E 05	3	0.76917E 04	
DESAJUSTE		0.22477E 06	5	0.44955E 05	5.845

Tabla 5.14

5.1.4.- DISCUSION DE LOS RESULTADOS

Los resultados obtenidos mediante los diseños axial y factorial fraccionado, muestran la ventaja que representa la utilización del primero frente al último, confirmando las conclusiones obtenidas en el apartado 4.1.3. En efecto, para la obtención de una ecuación significativa, válida para la aplicación del método de Box - Wilson, se han realizado $10 + 4 + 2 = 16$ experimentos mediante el diseño axial, frente a los $16 + 4 + 16 = 36$ realizados mediante los fraccionados de factorial.

Por otra parte se puede comprobar, observando los experimentos A6 y C6 (tablas 5.5 y 5.6 respectivamente), que se ha alcanzado el mismo óptimo, especialmente en las variables significativas. Este hecho cabía ya esperarlo tras la obtención de ecuaciones de primer orden significativas muy semejantes (obsérvese la similitud de los coeficientes estimados mediante ambos diseños, ecuaciones 5.33 y 5.71).

Finalmente las ecuaciones representativas del fenómeno en la subregión que se ha aceptado como óptima son asimismo del todo comparables, especialmente las variables más significativas (ecuaciones 5.59 y 5.82). Cabe pues concluir tras lo expuesto aquí y en el apartado 4.1.3 la plena validez de los diseños axiales para la estimación de ecuaciones de primer orden.

5.2.- ESTUDIO EXPERIMENTAL DE LOS DISEÑOS DE SEGUNDO Y TERCER ORDEN

La experimentación efectuada para el estudio de los diseños de segundo y tercer orden propuestos se ha limitado al cálculo de dos ecuaciones - una de segundo y otra de tercer orden - a modo de ejemplo de procedimiento en una situación experimental determinada. - Para ello, se ha elegido un caso práctico en el cual --- sean realmente útiles las técnicas que aquí se recomiendan. Así pues, se ha estudiado la viscosidad de cierta formulación tensioactiva en dos situaciones:

i) Para la obtención de una ecuación de segundo orden significativa.

ii) Para la obtención de una ecuación significativa, sea cual fuere su orden, dentro de una determinada región de interés.

5.2.1.- PRODUCTOS Y PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

Los componentes de la formulación tensioactiva objeto de estudio han sido los siguientes:

- Lauril eter sulfato sódico
- Superdietanolamida de coco
- Alquibetaína
- Cloruro sódico
- Agua desionizada

siendo los tres primeros de procedencia Tensia-Surfac S. A.

Todas las formulaciones se han preparado a peso constante igual a 160 g.. La mezcla se ha realizado en frío y los componentes se han pesado en el orden anteriormente expresado. Finalmente el pH de la formulación se ha ajustado con ácido acético a 6,5. Una vez -- desespumadas las mezclas, se han termostatizado a 25°C -- durante un período constante de 24 horas.

Las viscosidades han sido medidas con un viscosímetro Brookfield modelo LV1 con la aguja número 4 y velocidad de 30 rpm., efectuándose la medición un minuto despues de alcanzado el giro estacionario.

5.2.2.- VARIABLES SELECCIONADAS Y REGION ESTUDIADA

Las variables elegidas han sido el % en peso de alquilbetaína - variable X_1 - y el % en peso de cloruro sódico - variable X_2 - que intervienen en la formulación. El porcentaje de lauril eter sulfato sódico y el de superdietanolamida de coco, se han mantenido fijos en los valores de 25 y 2% respectivamente. El resto hasta 100 ha estado formado por agua desionizada:

25% Lauril eter sulfato sódico

2% Superdietanolamida de coco

X_1 % Alquilbetaína

X_2 % Cloruro sódico

$(73-X_1-X_2)$ % Agua desionizada

La región estudiada ha comprendido valo--

res de X_1 entre 3 y 10% y valores de X_2 entre 0 y 1%.

5.2.3.- RESULTADOS EXPERIMENTALES

Como punto inicial de esta experimentación y asimismo como centro de los diseños de segundo y tercer orden realizados, se ha elegido el punto de coordenadas:

$$X_1 = 6,50\% \quad (5.83)$$

$$X_2 = 0,50\% \quad (5.84)$$

mientras que los incrementos para cubrir la región de interés inmediato han sido los siguientes:

$$\Delta X_1 = 1,061\% \quad (5.85)$$

$$\Delta X_2 = 0,354\% \quad (5.86)$$

De acuerdo con las anteriores ecuaciones las variables han sido ortogonalizadas mediante el siguiente cambio:

$$X'_1 = \frac{X_1 - 6,50}{1,061} \quad (5.87)$$

$$X'_2 = \frac{X_2 - 0,50}{0,354} \quad (5.88)$$

Los resultados propiamente dichos se exponen separadamente en los apartados siguientes.

5.2.3.1.- Estimación de la ecuación de segundo orden

Para la obtención de una ecuación de segundo orden estadísticamente significativa se ha procedido a efectuar un diseño hexagonal combinado, ortogonal y rotatorio, con cuatro puntos centrales, de acuerdo con lo expresado en el apartado 3.2.1.2.

La matriz de diseño, referida a un radio de diseño $k^{1/2}$ (por consiguiente en este caso $2^{1/2}$) y con relación de radios 0,414, se presenta conjuntamente con los resultados experimentales en la tabla 5.15. La ecuación calculada según lo expresado en el apartado 1.2.10.3.1 y el análisis de varianza correspondiente se muestran en la tabla 5.16.

Como puede comprobarse la ecuación es globalmente no significativa (F_{exp} mayor que $F_{\text{tab}} = 8,89$ para 7 y 3 grados de libertad), por lo que se ha procedido a la reducción del intervalo experimental al 41,4% de su valor inicial. Así pues la región experimental actualmente en estudio comprende unos incrementos para las variables:

$$\Delta X_1 = 0,439\% \quad (5.89)$$

$$\Delta X_2 = 0,147\% \quad (5.90)$$

La nueva matriz de diseño referida a un radio 0,414 $2^{1/2}$ con la misma relación de radios anterior de 0,414, y para la que son válidas las ecuaciones de transformación 5.87 y 5.88, se presenta en la tabla 5.17, junto con los resultados experimentales. La ecuación y el análisis de varianza correspondiente se exponen en la tabla 5.18.

X0	X1	X2	X11	X22	X12	VISC.
1.000	1.414	0.0	1.560	-0.439	0.0	9040.00
1.000	-1.414	0.0	1.560	-0.439	0.0	2950.00
1.000	0.707	1.225	0.061	1.061	0.866	220.00
1.000	-0.707	1.225	0.061	1.061	-0.866	7360.00
1.000	0.707	-1.225	0.061	1.061	-0.866	5220.00
1.000	-0.707	-1.225	0.061	1.061	0.866	1650.00
1.000	0.585	0.0	-0.097	-0.439	0.0	8000.00
1.000	-0.585	0.0	-0.097	-0.439	0.0	6640.00
1.000	0.293	0.507	-0.353	-0.182	0.149	8150.00
1.000	-0.293	0.507	-0.353	-0.182	-0.149	8560.00
1.000	0.293	-0.507	-0.353	-0.182	-0.149	6270.00
1.000	-0.293	-0.507	-0.353	-0.182	0.149	4900.00
1.000	0.0	0.0	-0.439	-0.439	0.0	7700.00
1.000	0.0	0.0	-0.439	-0.439	0.0	7600.00
1.000	0.0	0.0	-0.439	-0.439	0.0	7400.00
1.000	0.0	0.0	-0.439	-0.439	0.0	7300.00

Tabla 5.15

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 2

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.71082E 09	16		
B 0	0.61850E 04	0.61207E 09	1	0.61207E 09	18362.030
B 1	0.10197E 04	0.73050E 07	1	0.73050E 07	219.150
B 2	0.52321E 03	0.19246E 07	1	0.19246E 07	57.739
B 3	-0.78678E 03	0.38212E 07	1	0.38212E 07	114.636
B 4	-0.23524E 04	0.34504E 08	1	0.34504E 08	1035.130
B 5	-0.30888E 04	0.29467E 08	1	0.29467E 08	884.020
RESIDUAL		0.21731E 08	10	0.21731E 07	
ERROR		0.10000E 06	3	0.33333E 05	
DESAJUSTE		0.21631E 08	7	0.30901E 07	92.704

Tabla 5.16

XC	X1	X2	X11	X22	X12	VISC.
1.000	0.585	0.0	0.267	-0.075	0.0	8000.00
1.000	-0.585	0.0	0.267	-0.075	0.0	6640.00
1.000	0.293	0.507	0.011	0.182	0.149	8150.00
1.000	-0.293	0.507	0.011	0.182	-0.149	8560.00
1.000	0.293	-0.507	0.011	0.182	-0.149	6270.00
1.000	-0.293	-0.507	0.011	0.182	0.149	4900.00
1.000	0.242	0.0	-0.017	-0.075	0.0	8120.00
1.000	-0.242	0.0	-0.017	-0.075	0.0	7300.00
1.000	0.121	0.210	-0.061	-0.031	0.025	8200.00
1.000	-0.121	0.210	-0.061	-0.031	-0.025	8170.00
1.000	0.121	-0.210	-0.061	-0.031	-0.025	8200.00
1.000	-0.121	-0.210	-0.061	-0.031	0.025	6890.00
1.000	0.0	0.0	-0.075	-0.075	0.0	7700.00
1.000	0.0	0.0	-0.075	-0.075	0.0	7600.00
1.000	0.0	0.0	-0.075	-0.075	0.0	7400.00
1.000	0.0	0.0	-0.075	-0.075	0.0	7300.00

Tabla 5.17

ECUACION Y ANALISIS DE VARIANZA
GRADO 2

	COEFICIENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	MEDIA CUADRATICA	F EXPERIMENTAL
TOTAL		0.90413E 09	16		
B 0	0.74625E 04	0.89102E 09	1	0.89102E 09	26730.670
B 1	0.11944E 04	0.17168E 07	1	0.17168E 07	51.505
B 2	0.25547E 04	0.78628E 07	1	0.78628E 07	235.865
B 3	-0.11834E 04	0.25335E 06	1	0.25335E 06	7.600
B 4	-0.23537E 04	0.10074E 07	1	0.10074E 07	30.222
B 5	-0.32685E 04	0.97055E 06	1	0.97055E 06	29.117
RESIDUAL		0.12996E 07	10	0.12996E 06	
ERROR		0.10000E 06	3	0.33333E 05	
DESAJUSTE		0.11996E 07	7	0.17136E 06	5.141

Tabla 5.18

Como puede observarse esta vez la ecuación es ya estadísticamente significativa al nivel de probabilidad del 95% al igual que todos sus coeficientes. Se ha obtenido finalmente pues una ecuación significativa en el espacio de las variables comprendido entre los incrementos expresados en las ecuaciones 5.89 y 5.90. Esta ecuación es:

$$y = -80861,86 + 19142,92X_1 + 82587,69X_2 - 1051,24X_1^2 - 18806,06X_2^2 - 8702,22X_1X_2 \quad (5.91)$$

expresada en coordenadas reales.

5.2.3.2.- Estimación de la ecuación de tercer orden

Si por el contrario interesa obtener una relación entre las variables estadísticamente significativa dentro de la región expresada mediante las ecuaciones 5.85 y 5.86, es necesario proceder a la estimación de una ecuación de tercer orden. Esto es así ya que según lo expuesto en el apartado anterior, no es posible la obtención de una ecuación de segundo orden estadísticamente significativa, dentro de la región estudiada. Así pues, se ha procedido a realizar el diseño de tercer orden formado por combinación de octógonos, con relación de radios 0,45 y con cuatro puntos centrales. Estos cuatro puntos centrales son los mismos por supuesto que los utilizados en la anterior experimentación. La matriz de diseño y los resultados obtenidos se muestran en la tabla 5.19.

La ecuación - calculada según lo expuesto en el apartado 3.3.2 - y el análisis de varianza correspondiente - apartado 3.3.3 - se muestran en la tabla --

X1	X2	Visc.(cp.)
1.000	1.000	1440.0000
1.000	-1.000	7300.0000
-1.000	1.000	7740.0000
-1.000	-1.000	1500.0000
1.414	0.0	8840.0000
-1.414	0.0	2720.0000
0.0	1.414	3000.0000
0.0	-1.414	2300.0000
0.450	0.450	8100.0000
0.450	-0.450	7300.0000
-0.450	0.450	8380.0000
-0.450	-0.450	4840.0000
0.636	0.0	7900.0000
-0.636	0.0	6680.0000
0.0	0.636	8800.0000
0.0	-0.636	5540.0000
0.0	0.0	7700.0000
0.0	0.0	7600.0000
0.0	0.0	7400.0000
0.0	0.0	7300.0000

Tabla 5.19

Resultados obtenidos con el diseño de tercer orden

5.20. Siendo el valor de F_{exp} igual a 4,41 y siendo menor que el correspondiente valor para F_{tab} con 7 y 3 grados de libertad ($F_{\text{tab}(7,3)} = 8,89$), la ecuación es globalmente significativa a un nivel de probabilidad del 95%. Lo mismo sucede con los coeficientes de primer y tercer orden considerados conjuntamente, al igual que los de segundo orden.

Se ha obtenido pues una ecuación de tercer orden estadísticamente significativa, y por tanto representativa del fenómeno dentro de la región deseada, o sea - en la región delimitada entre 5 y 8% para X_1 y 0 y 1% para X_2 (Apéndice 4), y cuya expresión en función de las variables reales es:

$$\begin{aligned} y = & - 80875,81 + 42371,73X_1 - 194489,88X_2 - 7395,92X_1^2 \\ & + 113271,94X_2^2 + 56163,21X_1X_2 + 438,62X_1^3 - \\ & - 31846,71X_2^3 - 3938,05X_1^2X_2 - 13059,94X_1X_2^2 \quad (5.92) \end{aligned}$$

La figura 5.1 muestra una representación paramétrica de la ecuación anterior. La zona englobada por la línea a trazos representa el campo experimental de estudio, la cual en coordenadas de diseño correspondería a un círculo de radio $2^{1/2}$.

5.2.4.- DISCUSION DE LOS RESULTADOS

Los resultados obtenidos con el diseño hexagonal combinado ortogonal muestran su utilización ventajosa frente al diseño factorial compuesto ortogonal y

ANALISIS DE VARIANZA
ECUACION DE ORDEN 3

	COEFICIENTE	S.CUADRATICA	GL	M.CUADRATICA	FEXP
B0	0.77269E 04	0.74884E 09	1		
B1	0.11021E 04				
B2	0.30747E 04				
B111	0.52388E 03	0.30815E 08	6	0.51358E 07	154.073
B222	-0.14128E 04				
B112	-0.15693E 04				
B122	-0.17365E 04				
B11	-0.91400E 03				
B22	-0.24296E 04	0.89381E 08	3	0.29794E 08	893.814
B12	-0.30391E 04				
TOTAL		0.87017E 09	20		
RESIDUAL		0.11296E 07	10		
ERROR		0.10000E 06	3	0.33333E 05	
DESARAJSTE		0.10296E 07	7	0.14709E 06	4.413

Tabla 5.20

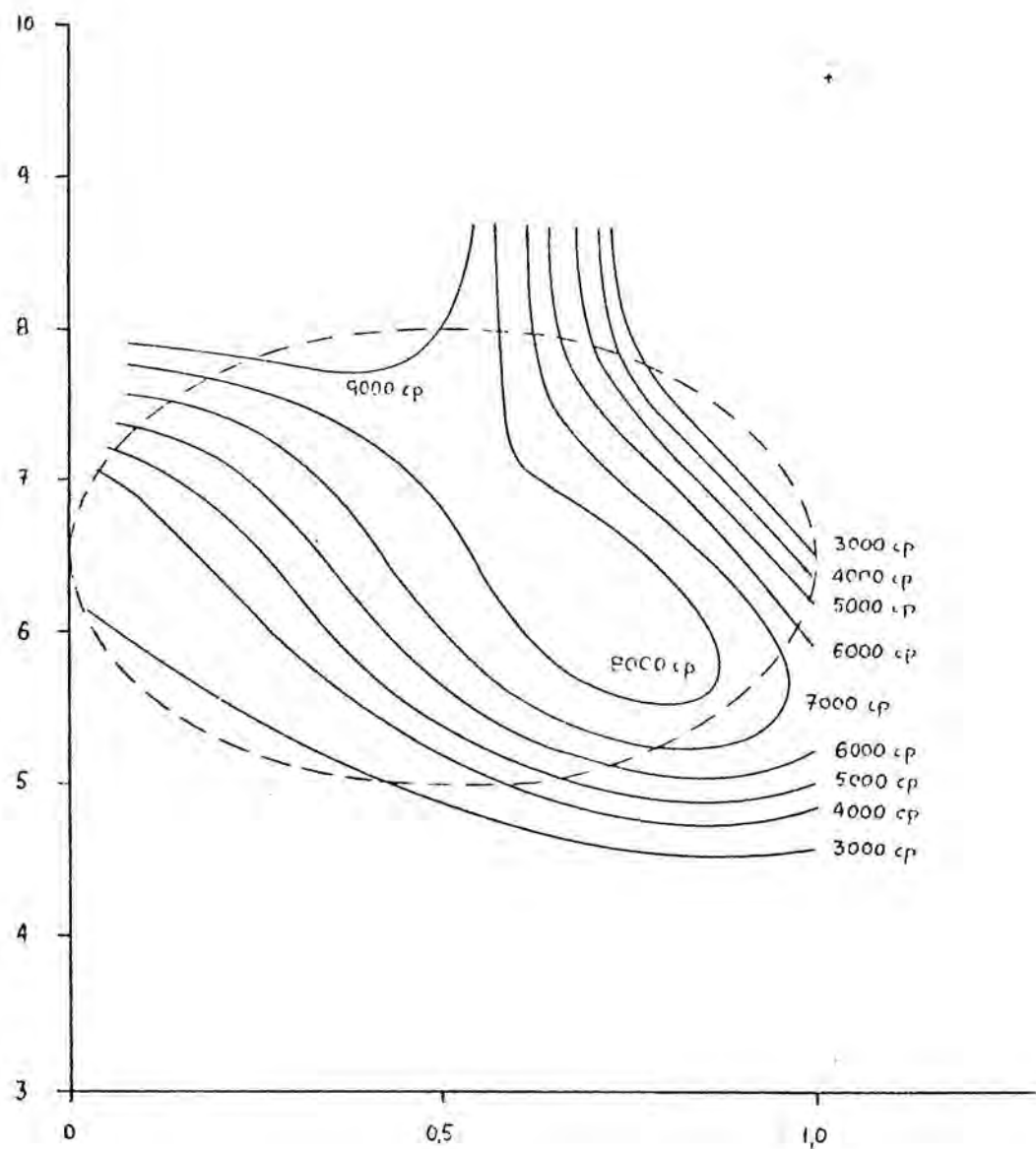


Fig. 5.1

Representación paramétrica de la
ecuación de tercer orden

rotatorio para la estimación secuencial de relaciones polinomiales de segundo orden. Como puede observarse, con veintidos puntos experimentales se ha conseguido ajustar una ecuación significativa de segundo orden, número inferior al que hubiese sido preciso caso de utilizar al -- clásico diseño factorial compuesto (con igual número de reducciones del campo experimental, hubiesen sido necesarios veinticuatro).

Por lo que respecta a la estimación de la ecuación de tercer orden, los resultados obtenidos son - una confirmación de los obtenidos mediante simulación experimental por ordenador (apartado 4.3.3) puesto que la ecuación ajustada reproduce con fidelidad el fenómeno -- dentro de la región estudiada.

6.- D I S C U S I O N G E N E R A L D E L O S
D I S E Ñ O S E X P E R I M E N T A L E S

El objeto de este apartado es realizar - una discusión general de los diseños existentes y especialmente de los propuestos en este estudio.

La subdivisión corresponde al número de - dimensiones de los espacios considerados y a los objetivos de la investigación.

6.1.- ESPACIOS BIDIMENSIONALES

Se estudian separadamente en este apartado, según se pretenda el alcance de ciertas condiciones óptimas mediante el método de Box - Wilson, o bien el ajuste de una relación polinomial.

6.1.1.- OBTENCION DE CONDICIONES OPTIMAS MEDIANTE EL METODO DE BOX - WILSON

La tabla 6.1 muestra esquemáticamente los diseños básicos que pueden utilizarse, así como sus posibilidades referentes a la estimación de ecuaciones de segundo y tercer orden. Es evidente que en esta tabla se podían haber incluido otros muchos diseños, puesto que cualquier diseño de orden superior es válido para la estimación de superficies de primer orden. No obstante, se alejarían notoriamente del requisito fundamental de todo diseño de poseer un número razonable de puntos experimentales.

En la referida tabla se observa que de todos los diseños expuestos sólo dos, axial y Simplex combinado, son realmente de aplicación secuencial (en el sentido de que no es necesario proceder a la repetición de la totalidad de los puntos del diseño en una zona experimental más reducida con el fin de obtener una ecuación significativa).

Los diseños Simplex, con un número de puntos experimentales realmente pequeño, resultan poco adecuados para el ajuste de ecuaciones de primer orden. Sus

COMPORTAMIENTO EN LA ZONA OPTIMA					
Tipo de diseño	N	N ₁	Estimación de ec. de 2º orden		Tipo de diseño formado
			N ₂	N ₃	
SIMPLEX	3 + n ₀	3	3	-	No es posible
AXIAL	4 + n ₀	2	4	8	Octogonal comb.
FACTORIAL	4 + n ₀	4 ó 2+n ₀	4	8	Octogonal comb.
PENTAGONAL	5 + n ₀	5	5	-	No es posible
SIMPLEX COMB.	6 + n ₀	3	{3 6	-	No es posible
HEXAGONAL	6 + n ₀	6	{- 6	-	No es posible

N = Número total de puntos del diseño

N₁ = Número mínimo de puntos adicionales para obtener una nueva ecuación de primer orden

N₂ = Número mínimo de puntos adicionales para obtener una ecuación de segundo orden

N₃ = Número mínimo de puntos adicionales para obtener una ecuación de tercer orden

n₀ = Número de puntos centrales

Tabla 6.1

principales inconvenientes son su escaso número de grados de libertad para efectuar las pruebas estadísticas necesarias para establecer la validez del modelo, y por otra parte, el elevado sesgo de sus estimados.

Los diseños Simplex combinados poseen como ventaja la posibilidad de construir, en la zona aceptada como óptima, un diseño hexagonal combinado, el cual, - como se sabe (apartado 3.2.1.2), es secuencial en la estimación de ecuaciones de segundo orden, y la secuencia de aplicación exige la repetición de sólo seis puntos experimentales.

No obstante, los diseños axiales resultan ser, sin lugar a dudas, los diseños óptimos para la estimación de ecuaciones de primer orden de forma secuencial. Entre las ventajas, ya mencionadas en la discusión de los diseños de primer orden (apartado 3.1.2), merecen ser destacadas la posibilidad de disponer de una nueva ecuación, cubriendo una zona experimental más reducida, con la repetición de tan solo dos puntos experimentales, y la de --- constituir una base sobre la cual es posible la construcción de un diseño octogonal - apto para la estimación de ecuaciones de segundo orden - así como, mediante la adición de un posterior octógono, la construcción de un diseño octogonal combinado, apto para la estimación de ecuaciones de tercer orden. Por otra parte las propiedades matemático estadísticas de los diseños axiales son las -- propias de cualquier diseño rotatorio de primer orden con momentos de tercer orden nulos, poseyendo pues todas las ventajas inherentes a esta clase de diseños.

6.1.2.- AJUSTE SECUENCIAL DE RELACIONES POLINOMIALES

El ajuste secuencial de relaciones polino

miales permite aprovechar la experimentación efectuada en la estimación de una ecuación de cierto orden, para estimar otra de orden superior mediante la realización de una serie adicional de puntos experimentales.

Si se desea ajustar dentro de una determinada región experimental una ecuación estadísticamente significativa de primer o de segundo orden, de manera secuencial, se puede disponer básicamente de los siguientes diseños:

- Diseño Simplex combinado
- Diseño pentagonal
- Diseño hexagonal

El primero y el tercero conducen en su aplicación secuencial a un diseño hexagonal combinado. Ambos, pentagonal combinado y hexagonal combinado, pertenecen al grupo de diseños formados por combinación de anillos concéntricos desarrollados en este trabajo. Todos ellos son rotatorios, y una discusión más detallada de los mismos puede encontrarse en los apartados 3.2.1.1 y 3.2.1.2. No obstante, cabe recordar la superioridad de los diseños hexagonales combinados frente a los pentagonales derivada de poseer un sesgo inferior en sus estimados de segundo orden.

Las particularidades de estos tres diseños en lo que se refiere al ajuste de ecuaciones de primer orden, así como en lo referido al número de puntos necesarios para su aplicación secuencial se resumen esquemáticamente en la tabla 6.1. Conviene mencionar aquí que tal y como se describió en el apartado 5.2.4, los diseños hexagonales combinados ortogonales resultan superiores al clásico diseño factorial compuesto ortogonal y rotatorio, en el sentido de que se precisa un número inferior de pun

tos experimentales en su aplicación secuencial para la obtención de una ecuación de segundo orden significativa.

Por otra parte, si dentro de una determinada región experimental interesa el ajuste secuencial de una ecuación estadísticamente significativa de primer, segundo o tercer orden, los diseños de partida más interesantes para ello son los siguientes:

- Diseño axial
- Diseño factorial
- Diseño heptagonal

El empleo del diseño heptagonal para el ajuste secuencial de una relación polinomial, se justifica únicamente cuando se poseen fundamentos suficientes para creer que la ecuación en cualquier caso no será de primer orden, y por otra parte, el precio por experimento resulta realmente elevado.

En la aplicación secuencial de los diseños heptagonales se forman diseños heptagonales combinados, los cuales pertenecen al grupo de los diseños formados por combinación de anillos concéntricos discutidos en el apartado 3.2.2. Para la estimación de ecuaciones de tercer orden conviene utilizar los diseños heptagonales combinados con una relación de radios aproximadamente de 0,5 y un número de puntos centrales igual a cuatro. Más detalles acerca de su utilización como diseños de tercer orden pueden encontrarse en el apartado 3.3.4.

Los diseños axial y factorial, son especialmente útiles para la estimación secuencial de ecuaciones de tercer orden, y resultan ser, para este fin, equivalentes. En efecto, esto es así ya que ambos se complementan para dar lugar a un diseño octogonal, capaz de es-

timar ecuaciones de segundo orden, y mediante la adición posterior de un nuevo octógono se obtiene un diseño octogonal combinado, el cual puede proporcionar ecuaciones de tercer orden. Por otra parte su secuencia de aplicación es idéntica (cuatro puntos ambos para la obtención del diseño octogonal). La relación de radios de los dos octógonos más recomendable es igualmente de un valor aproximado a 0,5 cuando se utilizan cuatro puntos centrales. Este tipo de diseño resulta como se recordará mucho más apropiado para la estimación de ecuaciones de tercer orden -- que el heptagonal combinado, ya sea por facilidad de cálculo, como por un sesgo menor en sus estimados. Una discusión más amplia se encuentra en el apartado 3.3.4.

6.2.- OTROS ESPACIOS K-DIMENSIONALES

Los diseños más útiles para la obtención de condiciones óptimas mediante el método de Box - Wilson en espacios de dimensión superior a dos son los siguientes:

- Diseño Simplex
- Diseño axial
- Diseño factorial
- Diseño Simplex combinado
- Diseño factorial combiando

De los cinco diseños señalados, sólo los axiales, Simplex combiando y factorial fraccionado combinado son secuenciales y por consiguiente de mayor interés. Dentro de estos últimos destaca el diseño axial por la gran ventaja que representa el disponer de una nueva ecuación con la sola repetición de dos puntos, y asimismo la de que con la adición de dos experimentos se obtiene una ecuación en el espacio $k+1$ dimensional (siendo k la dimensión del espacio primitivo).

El diseño factorial combinado y el diseño Simplex combinado presentan un número de puntos variable según la dimensión del espacio y según el grado de fraccionamiento adoptado en el caso de los factoriales tal como se describió en los apartados 3.1.1.1 y 3.1.1.2. La secuencia de aplicación de estos consiste en la reducción del bloque completo de puntos del fraccionado o Simplex de mayor radio. El número de puntos a repetir varía con el número de factores (tabla 3.9).

La obtención de diseños de orden superior a uno en espacios de más de dos dimensiones requiere un número de puntos ciertamente elevado. Los diseños más adecuados para este fin son los factoriales compuestos -- (tabla 1.2) y en algunos casos - para $k=7$ y para $k=9$ - - los diseños Simplex - Sum (tabla 1.5).

7.- RESUMEN Y CONCLUSIONES

La investigación realizada se puede resumir en los puntos siguientes:

1.- Se ha estudiado en profundidad - toda la bibliografía referente a la metodología de las superficies de respuesta, recopilándose todos los diseños experimentales rotatorios existentes.

2.- Se ha desarrollado y estudiado - un método para la aplicación secuencial de los diseños a xiales, en la estimación de ecuaciones de primer orden.

3.- Se han desarrollado y estudiado nuevos diseños rotatorios de primer orden tales como el Simplex combinado y el factorial fraccionado combinado.

4.- Se han desarrollado y estudiado los diseños rotatorios de segundo orden formados por com binación de dos anillos de puntos concéntricos, así como un método para su aplicación secuencial.

5.- Se ha realizado un estudio teóri co estadístico completo de los diseños rotatorios de ter cer orden, obteniéndose las condiciones para su utiliza ción práctica y desarrollándose las ecuaciones necesaria s para la fácil estimación de los coeficientes y para el posterior análisis de varianza.

6.- Se ha comprobado experimentalmen te la eficacia de los diseños formados por combinación - de anillos de puntos concéntricos en la estimación de e-

cuaciones de segundo orden.

7.- Se ha comprobado mediante simulación experimental por ordenador, así como mediante la -- realización de experimentos, la eficacia de los diseños de tercer orden desarrollados en esta investigación.

8.- Se ha desarrollado un tratamiento secuencial para la estimación de relaciones polinómicas mediante diseños de primero, segundo y tercer orden en espacios bidimensionales,

habiéndose obtenido las siguientes conclusiones:

1.- Los diseños axiales conducen a ecuaciones de primer orden muy similares a las que se obtienen con el diseño factorial o en su caso con el diseño factorial fraccionado correspondiente, hecho que se -- ha demostrado por realización de experimentos y simulación por ordenador.

2.- Los diseños axiales son superiores al diseño factorial o en su caso al diseño factorial fraccionado correspondiente, en su aplicación secuencial para la obtención de condiciones óptimas según el método de Box - Wilson y, muy especialmente, en espacios de dimensión elevada, al hacerse más patente la diferencia de puntos a realizar para la obtención de una nueva ecuación.

3.- Los diseños axiales son superiores al diseño factorial, o en su caso al diseño factorial fraccionado correspondiente, al permitir la incorporación al estudio de una nueva variable, así como al posibilitar una estimación más uniforme del error experimental en la subregión estudiada, con un número mínimo -

de experimentos.

4.- Los diseños Simplex combinados, así como los diseños factoriales fraccionados combinados son válidos para la estimación de ecuaciones de primer orden, y asimismo para la aplicación secuencial en la estimación de ecuaciones de primer orden, aunque sus propiedades resulten inferiores a las del diseño axial.

5.- Los diseños de segundo orden formados por combinación de hexágonos aventajan al diseño factorial compuesto en cuanto a número de puntos a repetir cuando la ecuación ajustada no es significativa, -- siendo por lo demás sus propiedades matemático estadísticas idénticas.

6.- Los diseños formados por combinación de dos octógonos, así como los formados por combinación de dos heptágonos, con una relación de radios de -- 0,5 y con cuatro puntos centrales resultan óptimos, en la mayoría de las situaciones experimentales, para la estimación de ecuaciones de tercer orden.

8.- RECOMENDACIONES

1.- Estudiar las posibilidades que pueden ofrecer los diseños formados por puntos distribuidos al azar y situados en un círculo, esfera o hiperesfera de radio predeterminado.

2.- Estudiar posibles estrategias experimentales para solventar los problemas ocasionados en un diseño experimental al poseer respuestas múltiples.

3.- En relación con la anterior recomendación, estudiar los métodos de optimación secuenciales - que no precisan respuestas cuantitativas (Complex, aleatorio, etc.), en comparación con el método de Box-Wilson.

APENDICE 1

Análisis de varianza para diseños ortogonales de primer orden

Las ecuaciones para la estimación de las distintas sumas cuadráticas y consiguientemente de las medias cuadráticas correspondientes, son las mismas que en el caso de los diseños rotatorios de primer orden (ecuaciones 1.45, 1.46 y 1.47)

El test adecuado para probar la validez estadística de la ecuación globalmente considerada, así como la de los coeficientes individualmente, se podrá realizar si para ello se dispone de una estimación de la varianza del error σ^2 . En la práctica se pueden presentar dos casos distintos (35):

a) La varianza del error se conoce a consecuencia de un alto número de experimentos anteriores.

En este caso se realiza un test de F entre la media cuadrática residual con $N - (k+1)$ grados de libertad y σ^2 con ∞ grados de libertad. Solamente si la varianza residual es menor significativamente a un nivel dado de probabilidad que la varianza del error, puede aceptarse como cierta la hipótesis de que la varianza residual es una estimación correcta del error y por tanto las desviaciones del modelo propuesto respecto a la verdadera superficie de respuesta solo son debidas a error experimental. En caso contrario el modelo no se ajusta a la verdadera superficie de respuesta.

b) La varianza del error es desconocida y se estima en el propio diseño.

Si se dispone de una estimación interna del error, realizada por replicación de puntos experimentales del diseño en condiciones tales que no impliquen la pérdida de la ortogonalidad, la suma cuadrática del error viene dada por:

$$E = \sum_{j=1}^p \sum_{l=1}^{n_1} (y_{jl} - \bar{y}_1)^2 \quad (\text{A.1.1})$$

en donde n_1 es el número de replicaciones de los p puntos, y la media cuadrática se evalúa con $p(n_1-1)$ grados de libertad.

Esta suma de cuadrados debida al error debe desglosarse de la residual, obteniéndose así una nueva residual denominada desajuste D :

$$D = R - E \quad (\text{A.1.2})$$

con $N - (k+1) - p(n_1-1)$ grados de libertad permitiendo la evaluación de la media cuadrática correspondiente.

En estas circunstancias se formula la hipótesis de que la media cuadrática del desajuste es una estimación correcta de la varianza del error. Esta hipótesis se comprueba mediante un test de F entre ambas medias cuadráticas en las mismas circunstancias anteriormente expresadas.

En ambos casos, si se constata que el mo-

delo polinomial de primer grado es correcto, debe realizarse un test de F sobre las medias cuadráticas de los coeficientes. Si éstas son mayores significativamente a un nivel de probabilidad dado que la del error, los coeficientes estimados no son manifestaciones del error y pueden considerarse significativos.

APENDICE 2

Determinación de la ecuación canónica en espacios k-dimensionales

La determinación de la ecuación canónica de una curva de segundo orden es un problema matemático bien conocido y que consiste en una traslación y rotación de ejes, de forma que se expone solo brevemente su resolución matemática general (35).

Sea:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i x_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} x_i x_j \quad (\text{A.2.1})$$

la ecuación de segundo orden, en donde $b_{ij}=b_{ji}$ y referida a un sistema de coordenadas x_1, x_2, \dots, x_k , de modo que mediante una traslación según un vector $\underline{\alpha}_i$, se pasa a un nuevo sistema coordenado x'_1, x'_2, \dots, x'_k , para obtener una transformación tal que cumpla:

$$\hat{y} = d + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} x'_i x'_j \quad (\text{A.2.2})$$

Puesto que por la traslación :

$$x_i = x'_i + \alpha_i$$

el cambio de coordenadas en la ecuación A.2.1 da lugar a:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i (x'_i + \alpha_i) + \dots$$

$$\begin{aligned}
 & \dots + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} (x_i' + \alpha_i)(x_j' + \alpha_j) = \\
 & = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i \alpha_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} \alpha_i \alpha_j + \sum_{i=1}^k b_i x_i' + \\
 & + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} \alpha_j x_i' + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} \alpha_i x_j' + \\
 & + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} x_i' x_j' \quad (A.2.3)
 \end{aligned}$$

Puesto que debe cumplirse la ecuación A.2.2, entonces:

$$\sum_{i=1}^k b_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} \alpha_j + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} \alpha_i = 0 \quad (A.2.4)$$

y siendo $b_{ij} = b_{ji}$, se tiene en la anterior ecuación que el término segundo es igual al tercero y por tanto:

$$2 \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} \alpha_j = - \sum_{i=1}^k b_i \quad (A.2.5)$$

Si la matriz \underline{A} es la matriz de los coeficientes b_{ij} , $\underline{\alpha}$ es el vector $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k)'$ y \underline{B} es el vector $(b_1, b_2, \dots, b_k)'$, la anterior ecuación puede escribirse:

$$\underline{A\alpha} = - \frac{1}{2} \underline{B} \quad (A.2.6)$$

en donde:

$$\underline{\alpha} = - \frac{1}{2} \underline{A}^{-1} \underline{B} \quad (\text{A.2.7})$$

ecuación que al determinar α , determina las coordenadas de S, centro del sistema.

El nuevo término independiente en la ecuación A.2.2, y que precisamente es y_s , respuesta en el centro del sistema, será:

$$d = b_0 + \sum_{i=1}^k b_i \alpha_i + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k b_{ij} \alpha_i \alpha_j \quad (\text{A.2.8})$$

La ecuación obtenida de esta forma, es decir, la ecuación A.2.2, no está referida a los ejes principales de la curva y por ello debe realizarse una rotación de ejes que determinará la ecuación canónica a través de la ecuación característica de \underline{A} :

$$\underline{\lambda I} - \underline{A} = 0 \quad (\text{A.2.9})$$

en donde λ_i son los valores propios, de forma que la ecuación canónica será:

$$\hat{y} = d + \sum_{i=1}^k \lambda_i X_i^2 \quad (\text{A.2.10})$$

Las ecuaciones de los nuevos ejes serán:

$$\underline{X} = \underline{C}^{-1} \underline{x}' \quad (\text{A.2.11})$$

en donde \underline{X} es el vector de los nuevos ejes coordenados $(X_1, X_2, \dots, X_k)'$, \underline{C} es la matriz de vectores propios de \underline{A} y \underline{x}' es el vector de ejes coordenados $(x'_1, x'_2, \dots, x'_k)'$.

El conjunto de todas las relaciones entre ejes será por consiguiente:

$$\underline{x} = \underline{x}' + \underline{a} \quad (\text{A.2.12})$$

$$\underline{x} = \underline{CX} - \frac{1}{2} \underline{A}^{-1} \underline{B} \quad (\text{A.2.13})$$

$$\begin{aligned} \underline{X} &= \underline{C}^{-1}(\underline{x} + \frac{1}{2} \underline{A}^{-1} \underline{B}) = \\ &= \underline{C}^{-1} \underline{x} + \frac{1}{2} \underline{C}^{-1} \underline{A}^{-1} \underline{B} \quad (\text{A.2.14}) \end{aligned}$$

APENDICE 3

Análisis de varianza para diseños ortogonales de segundo orden

Para diseños ortogonales de segundo orden es posible la estimación individual de las sumas cuadráticas asociadas a cada coeficiente. Así, las sumas cuadráticas debidas a los coeficientes de primer orden vienen dadas por:

$$S_i = \frac{\left(\sum_{u=1}^N y_u x_{iu} \right)^2}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2} \quad (\text{A.3.1})$$

mientras que las de segundo orden son:

$$S_{ii} = \frac{\left(\sum_{u=1}^N y_u x_{iiu} \right)^2}{\sum_{u=1}^N x_{iiu}^2} \quad (\text{A.3.2})$$

para las asociadas a los coeficientes cuadráticos y,

$$S_{ij} = \frac{\left(\sum_{u=1}^N y_u x_{iu} x_{ju} \right)^2}{\sum_{u=1}^N x_{iu}^2 x_{ju}^2} \quad (\text{A.3.3})$$

para las asociadas a los coeficientes de las interacciones. Cada una de estas sumas se estima con un grado de libertad, por lo que directamente representan las medias cuadráticas debidas a los coeficientes.

La suma cuadrática residual, con $N - \binom{k+2}{2}$ grados de libertad, vendrá dada por:

$$R = \sum_{u=1}^N y_u^2 - \sum_{i=0}^k S_i - \sum_{i=1}^k S_{ii} - \sum_{i=1}^k \sum_{j=i+1}^k S_{ij} \quad (A.3.4)$$

El test global de la ecuación y el de los coeficientes se realiza de forma idéntica que para los diseños ortogonales de orden uno (Apéndice 1), y es asimismo válido para diseños rotatorios de segundo orden, calculándose en este caso la residual según la ecuación 1.102.

APENDICE 4

Zona experimental de estudio y matriz de diseño

Normalmente cuando se utiliza un diseño experimental interesa el ajuste de cierta ecuación polinomial dentro de una determinada región en el espacio k -dimensional de las variables. Esta región viene determinada generalmente por unos valores extremos para cada variable, es decir, se dispone de cierto límite superior x_{iS} y cierto límite inferior x_{iI} entre los cuales interesa el ajuste de la ecuación. A partir de estos valores, se puede calcular fácilmente el punto central y los incrementos para la aplicación de cualquier diseño experimental. En efecto, el punto central vendrá dado por:

$$x_{i0} = \frac{x_{iS} + x_{iI}}{2} \quad (A.4.1)$$

y los incrementos:

$$\Delta x_i = \frac{x_{iS} - x_{iI}}{2} \quad (A.4.2)$$

Así, del u -ésimo experimento cuyas coordenadas de diseño son $x_{iu}^!$, se obtendrán fácilmente los niveles x_{iu} correspondientes a las variables reales (como puede observarse se sigue la nomenclatura utilizada en la parte experimental de esta investigación):

$$x_{iu} = x_{i0} + \Delta x_i x_{iu}^! \quad (A.4.3)$$

Conviene utilizar como matriz de diseño \underline{D} (cuyas componentes son las coordenadas de diseño x_{iu}^1) la matriz más simple posible, para así facilitar los cálculos necesarios para la estimación de la ecuación.

Así, para diseños factoriales se utilizarán las coordenadas:

$$(\pm 1, \pm 1, \dots, \pm 1)$$

Para diseños axiales :

$$(\pm 1, 0, \dots, 0), (0, \pm 1, \dots, 0), \dots, (0, 0, \dots, \pm 1)$$

y para espacios bidimensionales figuras inscritas en una circunferencia de radio $2^{1/2}$ (a excepción hecha de los diseños axiales cuyo radio recomendado es la unidad). Así, por ejemplo las coordenadas de un diseño pentagonal serán:

$$(1, 414, 0, 0), (0, 437, 1, 345), (0, 437, -1, 345),$$

$$(-1, 145, 0, 831), (-1, 145, -0, 831)$$

Las matrices de diseño estandarizadas (utilizadas en los apartados 3 y 4, son útiles para la comparación de diseños experimentales y para el estudio de sus propiedades matemático-estadísticas, pero ciertamente resultan incómodas en lo que se refiere a su utilización práctica.

Debe tenerse en cuenta por otra parte que al definir unos incrementos para las variables, el campo experimental de estudio no corresponde realmente a la diferencia $x_{iS} - x_{iI}$ sino a una región, que en coordenadas de diseño está incluida en una circunferencia, esfera o hiperesfera, cuyo radio - en general $k^{1/2}$ - se obtendrá

a partir de las coordenadas de diseño.

APENDICE 5

Cálculo de la varianza de las respuestas estimadas

Las ecuaciones ajustadas mediante diseños experimentales sirven para la predicción de respuestas en puntos cercanos al centro del diseño. La varianza de las respuestas estimadas aumenta de forma continua (figura 1.1) y para su cálculo se puede recurrir a la utilización de las variables estandarizadas del diseño.

Así, si interesa conocer la varianza de cierto punto cuyas coordenadas reales vienen dadas en términos de las x_{iu} , se calculará en primer lugar el radio del diseño ρ de acuerdo con:

$$\rho = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_{iu}^2} \quad (\text{A.5.1})$$

en donde

$$x_{iu}^* = \frac{x_{iu} - x_{i0}}{S_i} \quad (\text{A.5.2})$$

y

$$S_i = \left\{ \frac{\sum_{u=1}^N (x_{iu} - x_{i0})^2}{N} \right\}^{1/2} \quad (\text{A.5.3})$$

La varianza $V(y_x)$ del punto considerado, se puede calcular ahora, si se dispone de una estimación de la varianza σ^2 del error. Las ecuaciones a utilizar son la 1.41, 1.69 o 3.27 según sea la ecuación de primer, segundo o tercer orden respectivamente. Una forma -

de mejorar la varianza de los estimados consiste en la duplicación del diseño. Conviene recordar en este punto que los diseños axiales expuestos en el apartado 3.1.1.3 permiten la duplicación parcial de los mismos, circunstancia que les confiere todavía una mayor utilidad.

N O M E N C L A T U R A

<u>A</u>	Matriz de sesgo del diseño
<u>B</u>	Vector de los coeficientes
c	Factor de escala
<u>D</u>	Matriz de diseño
d	Orden del diseño
<u>H</u>	Matriz ortogonal
<u>I</u>	Matriz identidad
k	Número de dimensiones del espacio experimental
N	Número de experimentos
n	Número de puntos situados en un anillo
n_0	Número de puntos en el centro del diseño
Q	Función polinomial
<u>R</u>	Matriz ortogonal, $(k+1) \times (k+1)$, que consiste en una matriz ortogonal cualquiera <u>H</u> , cuya primera fila es el vector <u>u'</u> y su primera columna el -- vector <u>u</u>
r	Relación de radios entre dos anillos de puntos
S_i	Incremento ponderado de la variable ξ_i para su estandarización
<u>T</u>	Matriz de transformación del diseño

- \underline{t}' Vector en el espacio $k+1$ dimensional cuya primera componente es la unidad
- \underline{u} Vector transpuesto de \underline{u}'
- \underline{u}' Vector en el espacio $k+1$ dimensional cuyas componentes son $\underline{u}' = (1, 0, \dots, 0)$
- V Función varianza del diseño
- W Función inversa de V
- \underline{X} Matriz de las variables independientes del diseño
- \underline{X}_1 Matriz de las variables independientes adicional del diseño
- \underline{x} Vector que representa la posición de un determinado punto en el espacio k -dimensional
- \underline{x}' Vector en el espacio $k+1$ dimensional cuya primera componente es la unidad. Las restantes componentes son las mismas que las del vector \underline{x}
- x_{iu} Valor de la variable i -ésima en el u -ésimo punto experimental. En la parte experimental de este estudio se ha utilizado como variable real (equivalente a ξ_{iu})
- $x_{iu}^!$ Símbolo utilizado en la parte experimental de este estudio para designar al valor de la coordenada de diseño i en el u -ésimo experimento
- \underline{Y} Vector cuyas componentes son las respuestas observadas

- \bar{Y} Vector cuyas componentes son las respuestas estimadas mediante la ecuación ajustada
- α Valor de la coordenada axial en un diseño factorial compuesto
- $\underline{\beta}$ Vector cuyas componentes son los distintos coeficientes correspondientes al desarrollo en serie de Taylor de la función ϕ
- Δ Incremento de una variable para cubrir la región de interés
- η_u Respuesta de cierta función en el u-ésimo punto experimental
- λ Constante que relaciona los momentos de un diseño rotatorio
- μ Constante utilizada en las ecuaciones de la recta de ascenso
- ξ_{iu} Valor de la variable independiente i-ésima de cierta función desconocida en el u-ésimo experimento
- ρ Radio del diseño
- σ^2 Varianza del error experimental
- ψ Función desconocida

B I B L I O G R A F I A

- (1) Friedman, M. y Savage, L.J.; "Selected Techniques of Statistical Analysis", Ed. McGraw-Hill, Nueva York, 1947
- (2) Spendley, W., Hext, G.R. y Himsworth, F.R.; -- Techometrics, 4, No. 4, 441-461 (1962)
- (3) Box, M.J.; Computer J., 8, No. 1, 42 (1965)
- (4) Nelder, J.A. y Mead, R.; Computer J., 3, No. 4, 308 (1965)
- (5) Umeda, T. y Ichikawa, A.; Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., 10, No. 2, 229 (1971)
- (6) Glass, R.W. y Bruley D.F.; Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop. 12, No. 1, 6-10 (1973)
- (7) Satterwhite, F.E.; Technometrics, 1, 185 (1959)
- (8) Box, G.E.P. y Wilson K.B.; J. Roy. Statist. Soc., Series B, 13, 1-45 (1951)
- (9) Yates, F.; J. Roy. Statist. Soc. Suppl., 2, 181-247 (1935)
- (10) Box, G.E.P. y Hunter, J.S.; Ann. Math. Statist., 28, No. 1, 195-241 (1957)

- (11) Bose, R.C. y Draper, N.R.; Ann. Math. Statist., 30, 1097-1112 (1959)
- (12) Box, G.E.P. y Behnken, D.W.; Ann. Math. Statist., 31, 838-864 (1960)
- (13) Draper, N.R.; Ann. Math. Statist., 31, 23-33 - (1960)
- (14) Thaker, P.J.; J. Indian Soc. Agric. Statist., - 14, 110-120 (1962)
- (15) Das, M.N. y Narasimham, V.L.; Ann. Math. Sta---
tist., 33, 1421-1439 (1962)
- (16) Box, G.E.P. y Draper N.R.; Biometrika, 50, 335-
352 (1963)
- (17) Das, M.N.; Calcutta Statist. Assoc. Bull., 12,
31-46 (1963)
- (18) Herzberg, A.M.; Ann. Math. Statist., 38, 177-180
(1967)
- (19) Draper, N.R. y Herzberg, A.M.; Ann. Math. Statist.
39, 1995-2001 (1968)
- (20) Gardiner, D.A., Grandage, A.H.E. y Hader, R.J.;
Ann. Math. Statist., 30, 1082-1096 (1959)
- (21) Draper, N.R.; Ann. Math. Statist., 31, 865-874 -
(1960)
- (22) Draper, N.R.; Ann. Math. Statist., 32, 910-913 -
(1961)

- (23) Draper, N.R.; Technometrics, 4, 219-234 (1962)
- (24) Box, G.E.P.; Biometrika, 39, 49-57 (1952)
- (25) Hotelling, H.; Ann. Math. Statist., 15, 297-306 (1943)
- (26) Plackett, R.L. y Burman, J.P.; Biometrika, 33, 305-325 (1946)
- (27) Tocher, K.D.; J. Roy. Statist. Soc., Series B, 13, 39-42 (1951)
- (28) Aitken, A.C.; "Determinants and Matrices", Oliver & Boyd, Londres 1948
- (29) Box, G.E.P. y Hunter, J.S.; Technometrics, 3, - 311-351 (1961)
- (30) Box, G.E.P. y Hunter, J.S.; Technometrics, 3, - 449-458 (1961)
- (31) Davies, O.L.; "Métodos estadísticos aplicados a la investigación y a la producción", Aguilar, - 2a. ed., 1965
- (32) Davies, O.L.; "The Design and Analysis of Industrial Experiments", Oliver & Boyd, Londres, 2a. ed., 1963
- (33) Cochran, W.G. y Cox, G.M.; "Experimental Designs" John Wiley & Sons, Nueva York, 2a. ed., 1957
- (34) Box, G.E.P.; Biometrics, 10, 16-60 (1954)

- (35) Domingo, F.J.; Tesis Doctoral, Universidad de -
Barcelona, Facultad de Ciencias, Sección de Quí-
micas, Marzo 1974